



INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN INFORMATIQUE ET EN AUTOMATIQUE

**Modélisation géométrique, maillage et simulation des
structures granulaires – Application aux nanostructures**

**Partie I. Aspects théoriques et algorithmiques
de la modélisation – Cas de la dimension deux**

Azeddine Benabbou - Patrick Laug - Houman Borouchaki - Jian Lu

N° 6414

Janvier 2008

PROGRAMME 6

A large blue rectangle occupies the lower half of the page. Overlaid on it is a large, light grey stylized 'R' logo. To the right of the 'R', the words 'Rapport' and 'de recherche' are written in a white serif font, stacked vertically. A horizontal white line is positioned below the text.

*Rapport
de recherche*

Modélisation géométrique, maillage et simulation des structures granulaires – Application aux nanostructures

Partie I. Aspects théoriques et algorithmiques de la modélisation – Cas de la dimension deux

Azeddine Benabbou¹, Patrick Laug², Houman Borouchaki³ et Jian Lu⁴

Programme 6 – Calcul scientifique, modélisation et logiciel numérique
Projet Gamma

Rapport de recherche n° **6414** – Janvier 2008 - 49 pages

Résumé : Une structure granulaire est un assemblage de grains dont les tailles sont décrites par une distribution donnée. Les grains sont séparés par des interfaces appelées joints de grains. Plusieurs domaines de physique et d'ingénierie sont concernés par ces structures, notamment la métallurgie, la mécanique des roches, la biologie et l'élaboration de ciments. Un échantillon de ce type de structure est souvent modélisé par un rectangle rempli de disques (grains) en deux dimensions ou par un parallélépipède contenant des boules en trois dimensions. La modélisation géométrique d'une telle structure consiste donc à déterminer la répartition de l'ensemble des disques (ou des boules) disjoints respectant la distribution de taille spécifiée.

Dans ce rapport, un nouvel algorithme de génération de cette répartition de grains, basé sur une approche frontale utilisée habituellement dans des méthodes de construction de maillages bidimensionnels ou tridimensionnels, est proposé. En outre, une méthode d'optimisation est introduite afin d'équilibrer les épaisseurs des joints de grains. De fortes améliorations en temps de calcul ainsi qu'en taux de remplissage (densité) sont observées et reportées via des comparaisons avec des méthodes existantes. Par ailleurs, nous montrons que l'on peut transformer les grains circulaires ainsi générés en des grains polygonaux généralement observés dans la réalité. Quelques exemples de modélisations de nanostructures métalliques sont présentés.

Mots clés : grain, structure granulaire, remplissage d'un domaine, nanostructure, approche frontale, diagramme de Laguerre.

(Abstract : pto)

Ce travail est cofinancé par le Conseil Régional de Champagne-Ardenne et l'INRIA.

¹ INRIA Paris-Rocquencourt, azeddine.benabbou@inria.fr

² INRIA Paris-Rocquencourt, patrick.laug@inria.fr

³ Université de Technologie de Troyes, houman.borouchaki@utt.fr

⁴ Université Polytechnique de Hong Kong, jian.lu@inet.polyu.edu.hk

Geometric modeling, meshing and simulation of granular structures – Application to nanostructures

Part I. Theoretic and algorithmic aspects of the modelling – Case of two dimensions

Abstract: A granular structure is an assembly of grains whose sizes follow a distribution. Interfaces between these grains are called grain boundaries. Many fields of physics and engineering are concerned with these structures, especially metallurgy, rock mechanics, biology and cement production. A sample of this structure is often modeled by a rectangle filled by disks in two dimensions or by a parallelepiped containing spherical balls in three dimensions. Hence the geometrical modeling of such a structure consists in determining the repartition of the set of disjoint disks (or spherical balls) with respect to the specified size distribution.

In this report, a new sphere packing algorithm based on an advancing-front approach, usually used in bidimensional or tridimensional meshing methods, is proposed. Moreover, an optimization method is introduced in order to balance the thicknesses of the grain boundaries. Enhancements in computing time and density are observed and reported via comparisons with existing methods. In addition, we show that the generated circular grains can be transformed into polygonal cells generally observed in reality. Examples of metallic nanostructure modeling are presented.

Keywords: grain, granular structure, domain filling, sphere packing, nanostructure, advancing-front approach, Laguerre diagram.

Tables des matières

I. Introduction	4
II. Modélisation géométrique	6
II.1 Problématique	6
II.2 Approches existantes	7
III. Une nouvelle variante de la méthode frontale	12
III.1 Approche frontale dans le contexte du maillage.....	12
III.2 Schéma de notre algorithme et le lien avec l'approche frontale	13
III.3 Description détaillé de l'algorithme de remplissage	16
III.4 Exemple d'application.....	21
III.5 Comparaison avec des méthodes existantes	23
IV. Optimisation ou équilibrage de la structure	23
IV.1 Critère de qualité	25
IV.2 Les essais et l'algorithme proposé	26
V. Construction des cellules de Laguerre	34
V.1 Triangulation de Delaunay pondérée et diagramme de Laguerre.....	34
V.2 Rétrécissement des cellules	36
VI. Applications	38
VII. Conclusions et perspectives	44
VIII. Bibliographie	45

I. Introduction

Depuis une dizaine d'années, le préfixe "nano" est sans doute le plus évoqué dans les revues scientifiques. Des centaines de publications illustrent chaque mois le formidable défi lancé en 1959 par le prix Nobel de physique Richard Feynman : *"Il y a plein de place en bas de l'échelle, considérons la possibilité de faire un objet très petit, à l'image des cellules, aussi petit et aussi fonctionnel, que nous puissions commander, et qui exerce une fonction à cette échelle !... Qu'est-ce que cela voudrait dire ? La chimie reviendrait alors à placer les atomes un par un exactement à la position voulue !... Mais actuellement, nous devons toujours accepter les arrangements atomiques que la nature nous impose. Je ne doute pas que, lorsque nous aurons quelque contrôle sur l'arrangement des objets à une petite échelle, nous découvrirons que la matière possède une gamme possible de propriétés énormément plus étendue, et qu'ainsi nous pourrions réaliser beaucoup plus de choses"*.

Cette "intuition" de R. Feynman s'est vérifiée, car on peut prouver par l'expérience que le changement de la structure d'un matériau à l'échelle micro et nanométrique a un effet direct et considérable sur son comportement à l'échelle macroscopique (échelle de l'ingénieur). D'où l'intérêt d'améliorer les propriétés physiques d'un matériau en agissant sur sa structure à petites échelles. Dans un matériau ordinaire, la structure est formée d'une multitude de petits volumes polyédriques appelés grains dont la taille varie généralement entre 2 et 20 micromètres, et qui sont limités entre eux par des surfaces appelées joints de grains. En revanche, dans un matériau nanostructuré, la taille des grains est 1000 fois plus petite et la proportion des joints de grains est plus importante.

Il existe plusieurs méthodes permettant la réduction des tailles de grains d'un matériau : des méthodes dites de revêtement ou de déposition comme la PVD (*Physical Vapor Deposition*), la CVD (*Chemical Vapor Deposition*) ou l'électrodéposition, des méthodes d'auto-nanocristallisation comme la SPD (*Severe Plastic Deformation*) ou le procédé SMAT (*Surface Mechanical Attrition Treatment*), et des méthodes mixtes qui utilisent d'abord des techniques de revêtement ou de déposition suivies d'une nanocristallisation par des procédés de déformation plastique. Parmi toutes ces méthodes, nous nous intéressons particulièrement au procédé SMAT [1]. C'est une méthode purement mécanique similaire à un procédé de grenaillage introduisant un maximum de déformations plastiques sur la surface traitée. En effet, dans la plupart des cas, la rupture des matériaux s'opère en surface (fatigue, corrosion, ...), et ce phénomène est très sensible à la structure et aux propriétés des matériaux. Ainsi pour améliorer la qualité d'un matériau, sa surface est traitée avec une certaine profondeur qui varie en fonction des résultats voulus.

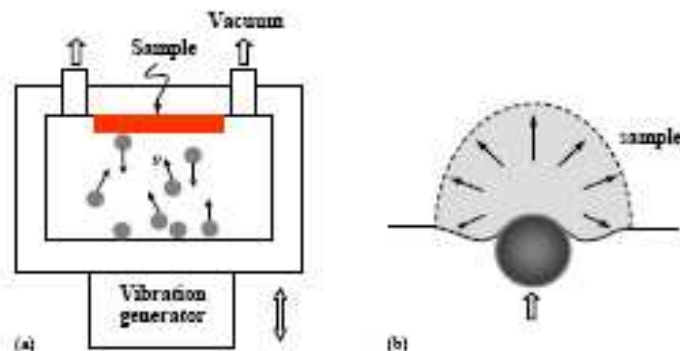


Figure 1. (a) Un schéma du dispositif expérimental utilisé dans le procédé SMAT.
(b) Les déformations que l'impact de la bille introduit dans la surface du matériau traité.

Plus précisément, le procédé SMAT (voir Figure 1-a) consiste à bombarder, dans des directions aléatoires, la surface du matériau avec des billes dont l'énergie cinétique est donnée par un générateur de vibrations. La Figure 1-b montre l'impact d'une bille sur la surface du matériau et la déformation plastique introduite. Le procédé SMAT est réalisé dans les conditions expérimentales suivantes :

- les petites sphères sont en acier (ou autres matériaux comme le verre ou la céramique) avec des surfaces lisses, et sont de 1 à 10 mm de diamètre,
- la fréquence de la chambre de vibration est entre 50 Hz et 20 kHz,
- la vitesse des sphères est entre 1 et 20 m/s,
- la direction de l'impact des sphères sur la surface est aléatoire (multidirectionnelle).

Les impacts multidirectionnels durant le procédé (Figure 1-b) induisent un important taux de déformation en surface du matériau traité, ainsi qu'une augmentation de température (entre 50 et 100°C observée pour le fer pur). Les déformations plastiques ainsi introduites en surface divisent les grains (de taille de quelques micromètres), formant ainsi une structure granulaire à l'échelle nanométrique.

Pour illustrer le lien entre le comportement macroscopique d'un matériau et sa structure à petites échelles, nous nous basons sur un schéma simplifié d'évolution de la limite élastique (la résistance) d'un matériau en fonction de la taille des grains constituant sa structure. Ce schéma s'exprime par la formule de Hall-Petch [2] comme :

$$\sigma_y = \sigma_o + \frac{k}{\sqrt{d_g}} \quad (1)$$

où σ_y est la limite élastique, σ_o la limite élastique du matériau ordinaire, k un coefficient dépendant du matériau et d_g la taille moyenne des grains. On remarque le lien entre la structure (la taille moyenne des grains d_g) et le comportement macroscopique du matériau (la limite élastique σ_y). Ainsi, comme illustré dans le graphe de la Figure 2, plus la taille moyenne des grains d_g diminue (une nanostructuration) plus la limite élastique σ_y augmente (amélioration de la qualité du matériau). Le graphe correspond à trois coefficients k différents suivant la nature de la structure granulaire sous-jacente du matériau, respectivement de quelques micromètres à 100 nm, de 100 nm à 10 nm et de 10 nm à quelques nm). Notons que la courbe régresse au-delà de 10 nm (dans le troisième intervalle), ceci étant dû à des phénomènes physiques complexes détaillés dans [2].

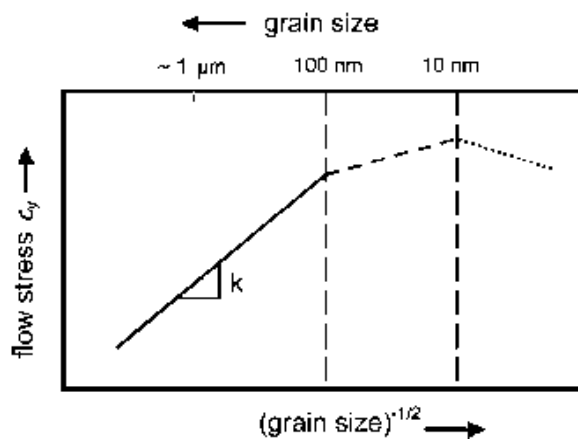


Figure 2. Variation d'une propriété physique (ici la limite élastique) en fonction de la taille moyenne des grains.

L'intervalle qui nous intéresse est celui dont la taille des grains varie entre 100 et 10 nm (la couche nanostructurée). On observe que le meilleur comportement (en particulier par rapport à la limite élastique) est atteint au sein de cet intervalle. Ce schéma est une illustration très simplifiée d'un phénomène plus complexe dans la réalité. En effet, les mécanismes de déformation responsables des propriétés des nanomatériaux ne dépendent pas uniquement de la taille moyenne des grains, mais sont aussi fortement influencés par la carte de tailles des grains au sein de la structure ainsi que des angles d'orientation des joints de grains [2].

L'objectif de notre étude est de simuler les propriétés mécaniques des matériaux issus du procédé SMAT ayant une nanostructure avec des tailles de grains de 10 à 15 nm sur une épaisseur d'une dizaine à une centaine de micromètres. La première étape de cette étude, qui est l'objet de ce rapport, est la modélisation géométrique des nanostructures (en tant que structures granulaires).

La **section 2** présente la modélisation géométrique d'une structure granulaire, avec un état de l'art sur les méthodes existantes. Dans la **section 3**, nous introduisons une nouvelle approche et nous la comparons à des algorithmes existants. Un procédé d'optimisation dont l'objectif est d'équilibrer les structures générées est discuté dans la **section 4**. La transformation de ces structures en des diagrammes de Laguerre (où les disques deviennent des cellules de Laguerre) est détaillée dans la **section 5**. Des applications numériques sont données dans la **section 6**. La dernière **section 7** est un ensemble de conclusions et de perspectives.

II. Modélisation géométrique

II.1 Problématique

Un domaine nanostructuré peut être décrit par un rectangle en deux dimensions ou un parallélépipède en trois dimensions, contenant des disques ou des boules de rayons définis par une distribution donnée. Les disques ou les boules représentent les grains et les espacements entre ceux-ci les joints de grains. Dans la réalité, selon les résultats expérimentaux, les grains ressemblent plutôt à des cellules de Laguerre observées par microscopie (voir Figure 3).

Outre les simplifications des calculs géométriques, cette modélisation des grains par des disques (ou des boules) est une bonne approximation pour des problèmes complexes où les calculs avec les vraies formes de grains sont très difficiles à réaliser.

Plus précisément, cette modélisation simplifiée d'une nanostructure consiste à remplir le domaine avec des disques ou des boules, de telle manière que :

- la distribution des rayons soit respectée,
- les grains soient séparés par des joints de grains d'épaisseur spécifiée,
- la structure soit la plus dense possible,
- l'assemblage des disques (ou des boules) soit le plus irrégulier possible (pas de périodicité).

Cet assemblage de disques (ou de boules) peut éventuellement être transformé (via des techniques de triangulation de Delaunay pondérée) en une structure composée de cellules de Laguerre, reflétant mieux la géométrie de ces structures. La Figure 3 montre des grains d'or nanostructuré [2] dans la réalité, et on peut remarquer la ressemblance avec des cellules de Laguerre.

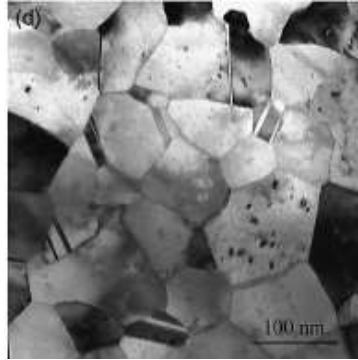


Figure 3. Grains en forme de cellules de Laguerre observées par microscopie.

À partir d'observations par microscopie, on peut établir les histogrammes de la distribution des tailles de grains (voir Figure 4 pour un échantillon de fer pur nanostructuré [3]).

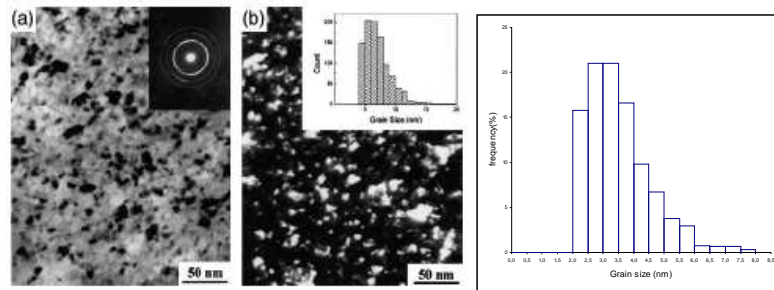


Figure 4. La structure observée par microscopie d'un échantillon de fer pur nanostructuré. Les histogrammes représentent la distribution (fréquences en fonction des rayons) pour cet exemple.

Comme nous l'avons indiqué précédemment, l'objectif de la modélisation est de reproduire, le plus fidèlement possible, la géométrie observée par microscopie ainsi que la distribution correspondante.

Dans la suite, nous rappelons quelques méthodes principales de génération des structures granulaires, en précisant leurs avantages et leurs inconvénients.

II.2 Approches existantes

Cette section présente une vue globale sur les différentes approches de remplissage d'un domaine granulaire en deux dimensions classifiés généralement en deux grandes familles de techniques [4] : techniques dynamiques et techniques constructives.

II.2.1 Techniques dynamiques

Les techniques dynamiques sont basées sur des bougés et/ou des changements de taille des particules. Les mouvements de ces particules peuvent être calculés soit par des modèles purement géométriques (plus simples) soit par des modèles dynamiques (plus complexes) où chaque particule est dotée d'une ou de plusieurs propriétés physiques lui permettant de trouver une position d'équilibre en fonction de ses interactions avec les autres particules. Les méthodes dynamiques sont généralement très coûteuses en temps de calcul, car souvent la position et/ou la taille de chaque grain doit être calculée tout au long du processus de remplissage. Cet inconvénient rend ces méthodes moins utilisées que les techniques constructives.

Parmi les techniques dynamiques, nous rappelons les cinq méthodes les plus utilisées : la compression isotrope, l'expansion de particules, la déposition gravitationnelle, l'entassement multicouche, et le réarrangement collectif.

Compression isotrope, "Isotropic compression". Il s'agit de créer un domaine virtuel (beaucoup plus grand que le domaine réel) dans lequel on place des particules très espacées entre elles. Ensuite, on fait converger les frontières de ce domaine d'une façon isotrope vers le domaine réel tout en contrôlant les intersections entre les particules (voir Figure 5). Cette méthode a été utilisée en trois dimensions par Lin et Ng [11].

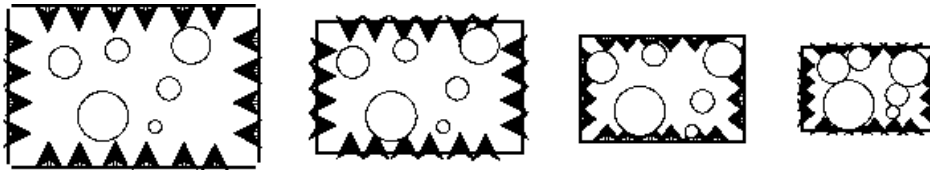


Figure 5. Illustration de la méthode de compression isotrope.

Expansion de particules, "Particle expansion". Dans un premier temps, on place le nombre de particules souhaité dans le domaine, avec des diamètres plus petits que les diamètres finals. Ensuite, on fait grossir les grains progressivement jusqu'à l'obtention de la densité souhaitée (Figure 6). Cette méthode a été utilisée par plusieurs auteurs dont Itasca [12], Boutt et McPherson [13], Sakaguchi et Murakami [14] et O'Sullivan [15].

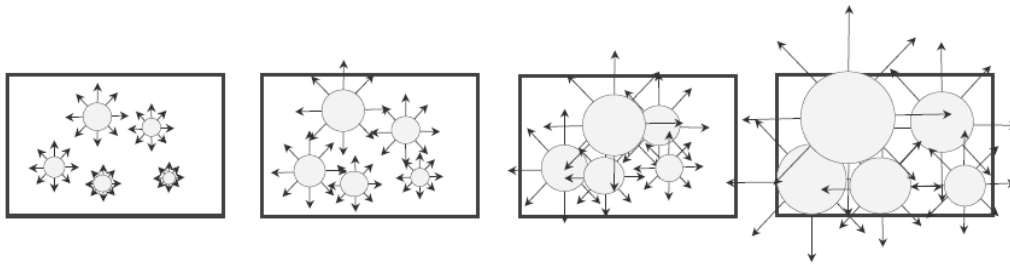


Figure 6. Expansion de particules.

Déposition gravitationnelle, "Gravitational deposition". Pour cette méthode, on ne change ni la taille du domaine ni celle des grains. En fait, chaque particule est dotée d'un poids (relatif à son rayon par exemple) et trouve sa position d'équilibre sous l'effet de la gravitation (Figure 7). Cette méthode est citée et proposée par plusieurs auteurs dont Thomas [16], Feng et al [6] et Ferrez [17].

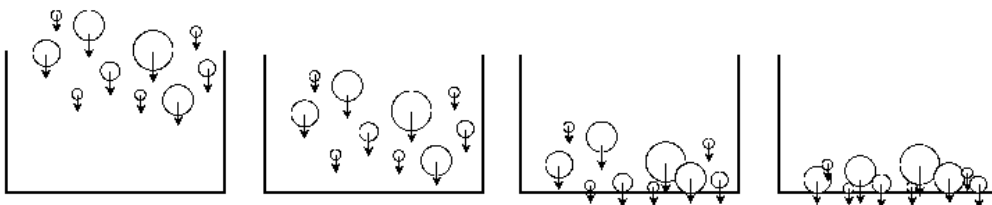


Figure 7. Déposition de particules sous l'effet de leurs poids.

Entassement multicouche, "Multi-layer Undercompaction Method". Comme son nom l'indique, cette méthode consiste à faire un remplissage couche par couche. Pour chaque couche, on commence par générer un nombre de particules suffisamment espacées dans le domaine à remplir, ensuite on les fait compacter entre elles et les entasser sur la couche précédente (Figure 8). Pour les détails de cette méthode voir Jiang et al [10].

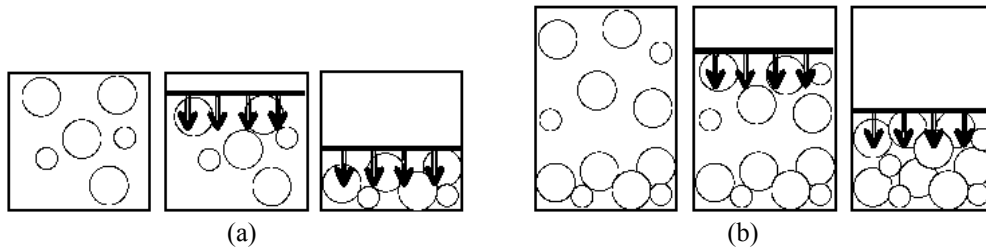


Figure 8. Entassement de deux couches, a) première couche, b) deuxième couche.

Réarrangement collectif, "Collective rearrangement techniques". Dans ces techniques, le nombre de particules est connu. Initialement, les particules sont placées aléatoirement dans le domaine à remplir et donc les intersections sont permises. Pour éliminer ces intersections, on fait bouger et/ou rétrécir les grains progressivement. Dans chaque étape, le déplacement de chaque grain est calculé en se basant sur les intersections constatées avec ses voisins (Figure 9). Parmi les auteurs qui ont utilisé cette méthode, on cite notamment Lubachevsky et Stillinger [5].

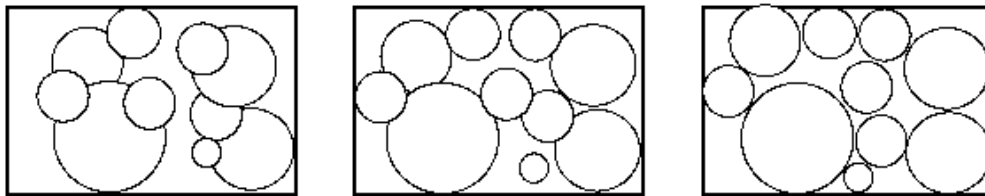


Figure 9. Les différentes étapes de la méthode du réarrangement collectif.

II.2.2 Techniques constructives

Dans les techniques constructives, les calculs considérés sont purement géométriques, et la position et souvent aussi la taille des grains sont conservées tout au long du processus de remplissage. Ces méthodes présentent une solution alternative avantageuse par rapport aux techniques dynamiques.

Parmi les nombreux algorithmes de nature constructive que l'on trouve dans la littérature, nous rappelons : l'inhibition séquentielle, les techniques de dropage, le modèle de Stienen, le modèle de Lily-Pond et la méthode frontale.

Inhibition séquentielle, "Sequential inhibition model". Les rayons des particules sont générés de façon à respecter la distribution, tandis que les positions sont proposées aléatoirement. Lorsqu'une nouvelle particule est en conflit avec celles qui existent déjà dans le domaine, alors la position de celle-ci est rejetée (en gardant le même rayon) et une nouvelle position aléatoire est proposée. Le processus est arrêté lorsqu'aucune nouvelle particule ne peut être insérée dans le domaine (voir Figure 10).

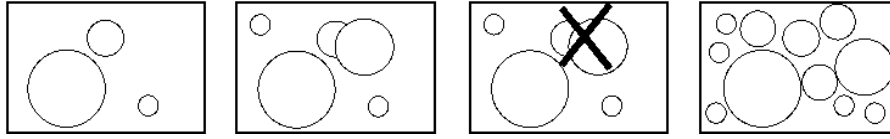
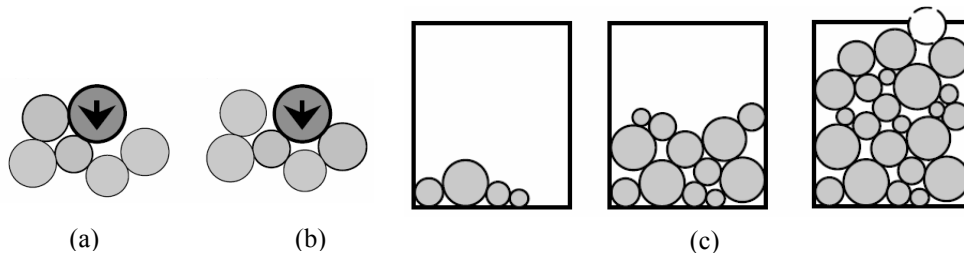


Figure 10. Illustration de la méthode d'inhibition séquentielle.

Cette méthode génère souvent des assemblages avec une faible densité. Elle a été utilisée par plusieurs auteurs dont Stoyan [19], Evans [18] et Itasca [12].

Méthode de droppage, "Dropping method". Cette méthode est la variante en deux dimensions des techniques de sédimentation "*sedimentation model*", et a été utilisé notamment par Bagi [20]. Le principe est relativement simple : on commence par remplir une première couche (souvent la couche inférieure) du domaine, ensuite une nouvelle particule est ajoutée à chaque étape. Dans un premier temps, la position d'une nouvelle particule est calculée de telle manière que celle-ci soit en contact avec deux particules existantes et/ou la frontière du domaine. La position finale d'une nouvelle particule est calculée de telle manière que son équilibre, sous l'effet d'une force verticale, soit stable (voir Figure 11).

Figure 11. (a) Position instable. (b) Position stable.
(c) Exemple d'un remplissage par la méthode de droppage.

Le modèle de Steinen. La première étape consiste à placer aléatoirement N points dans le domaine étudié. Ensuite, pour chaque point, on détermine la distance à son plus proche voisin. On obtient ainsi un disque, dont le rayon vaut la moitié de cette distance, autour de chaque point (voir Figure 12).

Le modèle de Lily-Pond. Comme dans le modèle de Steinen, on commence par générer aléatoirement N points dans le domaine étudié, et ces points sont assimilés à des disques de rayons nuls. Ensuite, ces disques sont progressivement dilatés avec une vitesse constante, et la taille finale d'une particule est définie lorsque celle-ci entre en contact avec une autre particule. Avec cette méthode on assure, pour chaque grain, un nombre de contacts au moins égal à 1 [22].

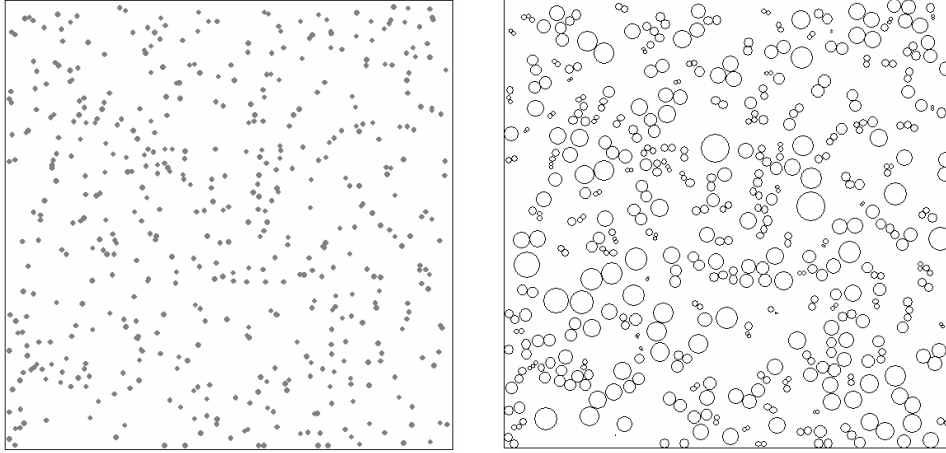


Figure 12. Exemple d'un assemblage de 500 particules générées par le modèle de Steinen dans un domaine de dimensions 10×10 .

Cette méthode a l'inconvénient majeur de générer des assemblages avec une très faible densité [21].

La méthode frontale. Le remplissage par la méthode frontale est basé sur la propagation d'un front de la frontière du domaine vers l'intérieur, ou de l'intérieur vers la frontière, jusqu'à son recouvrement complet. Cette approche a été utilisée par plusieurs auteurs sous différentes formes, nous rappelons en particulier "*the closed front method*" proposée par Feng et al [6] et "*the inwards packing method*" proposée par Bagi [7].

The closed front method commence par construire un front initial (un triangle) formé par trois particules placées au centre du domaine. Ensuite, chaque nouvelle particule est ajoutée au domaine en l'attachant à deux particules existantes. Voir la Figure 13 pour une illustration de la méthode.

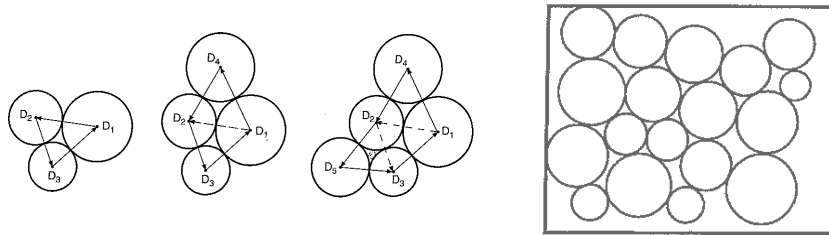


Figure 13. À gauche : illustration de la méthode du front fermé. À droite : un exemple de remplissage avec cette méthode.

Cette méthode aboutit généralement à des espaces vides au voisinage de la frontière du domaine. Pour pallier cet inconvénient, les auteurs Feng et al [6] ont proposé une autre solution : la méthode du front ouvert "*the open front method*" qui ressemble à la méthode de droppage.

Dans le cas de *the inwards packing method*, le front initial est un ensemble de segments formés par des particules posées contre le côté interne de la frontière du domaine. Le remplissage se fait ensuite vers l'intérieur en suivant une spirale fermée (voir Figure 14).

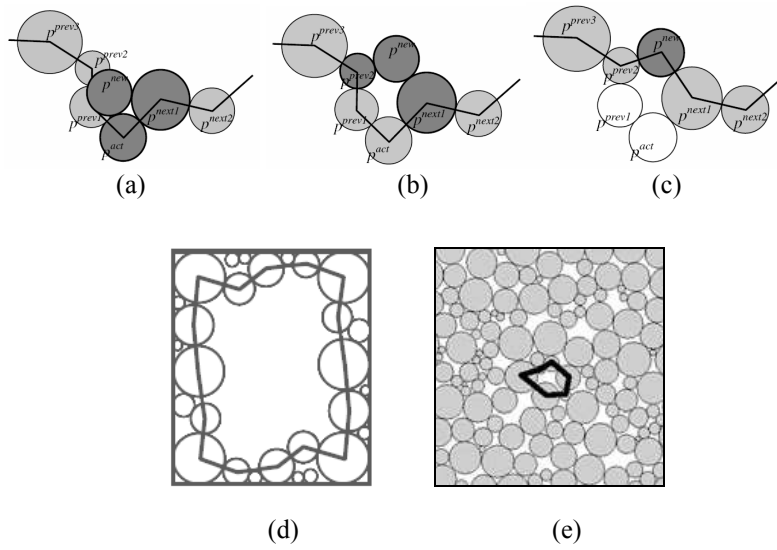


Figure 14. (a) (b) Différentes étapes pour placer une nouvelle particule. (c) Actualisation du front. (d) Exemple de front initial. (e) Extrait d'un assemblage fini montrant le front final.

Parmi ces méthodes, celle de Bagi "*the inwards packing method*" semble être la mieux adaptée à notre problématique. Cependant, cette méthode présente plusieurs inconvénients majeurs, notamment des complications pour la sélection et la construction des segments (voir [7] pour les détails) et sa généralisation en trois dimensions.

III. Une nouvelle variante de la méthode frontale

Dans cette section, nous présentons une nouvelle variante de la méthode frontale, cette dernière étant habituellement utilisée pour générer des maillages de qualité de domaines bidimensionnels. Nous commençons par rappeler le principe de l'approche frontale telle qu'elle est introduite dans le contexte du maillage. Ensuite nous établissons un lien entre l'approche frontale du maillage et une méthodologie de remplissage de domaine par des grains dont la taille est spécifiée par une distribution donnée. Le schéma général de ce nouvel algorithme est détaillé. Plusieurs exemples d'applications sont donnés, notamment la modélisation du fer pur nanostructuré [3]. Enfin, notre approche est comparée à celle de Lubachevsky et Stillinger (*the collective rearrangement techniques*) [5] ainsi qu'à celle de Bagi (*the inwards packing method*) [7].

III.1 Approche frontale dans le contexte du maillage

La résolution par la méthode des éléments finis d'un problème physique formulé en termes d'équations aux dérivées partielles s'appuie sur une discrétisation spatiale ou maillage du domaine étudié. La convergence de cette méthode ainsi que la qualité de la solution dépendent fortement de la qualité en forme des éléments du maillage (la forme idéale étant celle d'un élément équilatéral pour un triangle). De nombreuses méthodes permettent de construire, généralement à partir de la donnée de la frontière du domaine de calcul, un maillage de celui-ci. Ces méthodes diffèrent principalement par la façon dont sont générés les nœuds intérieurs du maillage du domaine. En supposant qu'une discrétisation du contour du domaine est déjà construite, la méthode frontale offre un moyen puissant pour la construction d'un maillage aussi régulier que possible du domaine. En effet, elle utilise le fait que des entités du maillage sont déjà construites et place les points internes d'une manière optimale par rapport à ces entités. En l'occurrence, la discrétisation de la frontière du domaine fournit des entités qui doivent faire

partie du maillage du domaine. Cette méthode consiste principalement à appliquer d'une manière itérative les procédures suivantes :

- définir un front constitué de quelques entités du maillage,
- placer des points internes d'une manière optimale par rapport à ce front,
- connecter les nouveaux points générés aux autres entités du maillage déjà existantes.

La première procédure est cruciale dans la mesure où la convergence de la méthode en dépend. Quant aux deux autres procédures, elles agissent sur la régularité du maillage.

Parmi les méthodes frontales, plusieurs variantes ont été proposées qui diffèrent principalement par le fait que l'on remplit un domaine vide ou que l'on modifie un premier maillage grossier du domaine. Dans le premier cas, le front représente la frontière entre la partie du domaine déjà maillée et le reste du domaine qui est encore vide, alors que dans le second cas le front sépare des éléments jugés bons des autres éléments. Dans chacun des cas, les points internes sont définis de la même manière afin de vérifier un critère de taille d'éléments assurant la régularité du maillage. En effet, la construction locale d'un élément équilatéral ne peut garantir une régularité globale, en particulier si le pas de la discrétisation des contours n'est pas constant. Chaque point interne généré dans le premier cas est connecté uniquement à l'élément du front qui a permis de le définir, alors que plus de connexions peuvent être établies dans le second cas suivant le critère utilisé pour insérer le point dans le maillage. En bref, l'avantage de la première approche est que le front est naturellement défini et sa gestion est simple. En contrepartie, la validation d'un nouvel élément généré se fait via la recherche d'intersections éventuelles avec des entités voisines et, tant que le front est non vide, le domaine n'est pas encore complètement maillé. De même l'avantage de la seconde approche est que, d'une part, le domaine est complètement maillé même si le front n'est pas vide et, d'autre part, que les points générés sont naturellement insérés dans un maillage (ce qui évite les recherches d'intersection), en revanche le front doit être correctement identifié et géré afin de garantir la convergence de la méthode.

III.2 Schéma de notre algorithme et le lien avec l'approche frontale

L'approche frontale adoptée dans notre cas est celle où le front représente la frontière entre la partie du domaine déjà maillée et le reste du domaine qui est encore vide (vue dans la section précédente). L'analogie entre notre algorithme de remplissage et l'approche frontale consiste à représenter les nœuds du maillage par des disques (grains) et les éléments par l'assemblage dense de 3 disques (grains) formé à partir de 2 disques. La particularité de notre algorithme est que le rayon du troisième disque est spécifié de manière aléatoire respectant une distribution donnée. Le schéma général de notre approche est le suivant :

Construire un front initial défini par une chaîne de couples de disques tangents entre eux et aussi tangents à la frontière du domaine.

Tant que le front n'est pas vide faire :

- 1. choisir un rayon de manière aléatoire tout en respectant la distribution spécifiée,*
- 2. choisir un élément du front (un couple de disques représenté par un segment),*
- 3. définir la position du nouveau disque par rapport à l'élément du front sélectionné,*
- 4. analyser les conflits (les intersections éventuelles du nouveau disque avec les disques déjà générés),*
- 5. s'il n'y a aucun conflit, le disque est généré. Le front est actualisé (le segment du front choisi est supprimé et deux nouveaux segments sont introduits) et l'algorithme reprend à 1,*
- 6. sinon choisir un autre segment dans le front et reprendre à 3,*
- 7. si aucun segment du front ne permet de générer le nouveau disque alors considérer le segment initial choisi, et parmi les disques en conflit avec le nouveau disque à générer sélectionner celui qui maximise la densité par rapport à l'assemblage. Réactualiser le front en supprimant le segment initial et éventuellement des segments existants connectant le disque sélectionné à ceux formant le segment initial et en ajoutant éventuellement un nouveau segment résultant. Reprendre à 2.*

Fin du tant que.

Algorithme 1 : Le schéma global de notre algorithme.

La première étape de notre algorithme est de créer un front initial au voisinage de la frontière du domaine. Ensuite le remplissage s'effectue par front vers l'intérieur. Chaque front est constitué d'un ensemble de segments orientés, et est doté d'un niveau. Pour la convergence de la méthode, le remplissage à partir d'un front de niveau n n'est amorcé que lorsque tous les fronts de niveaux inférieurs sont complètement saturés. La Figure 15 illustre quelques étapes de cet algorithme correspondant à des différents fronts.

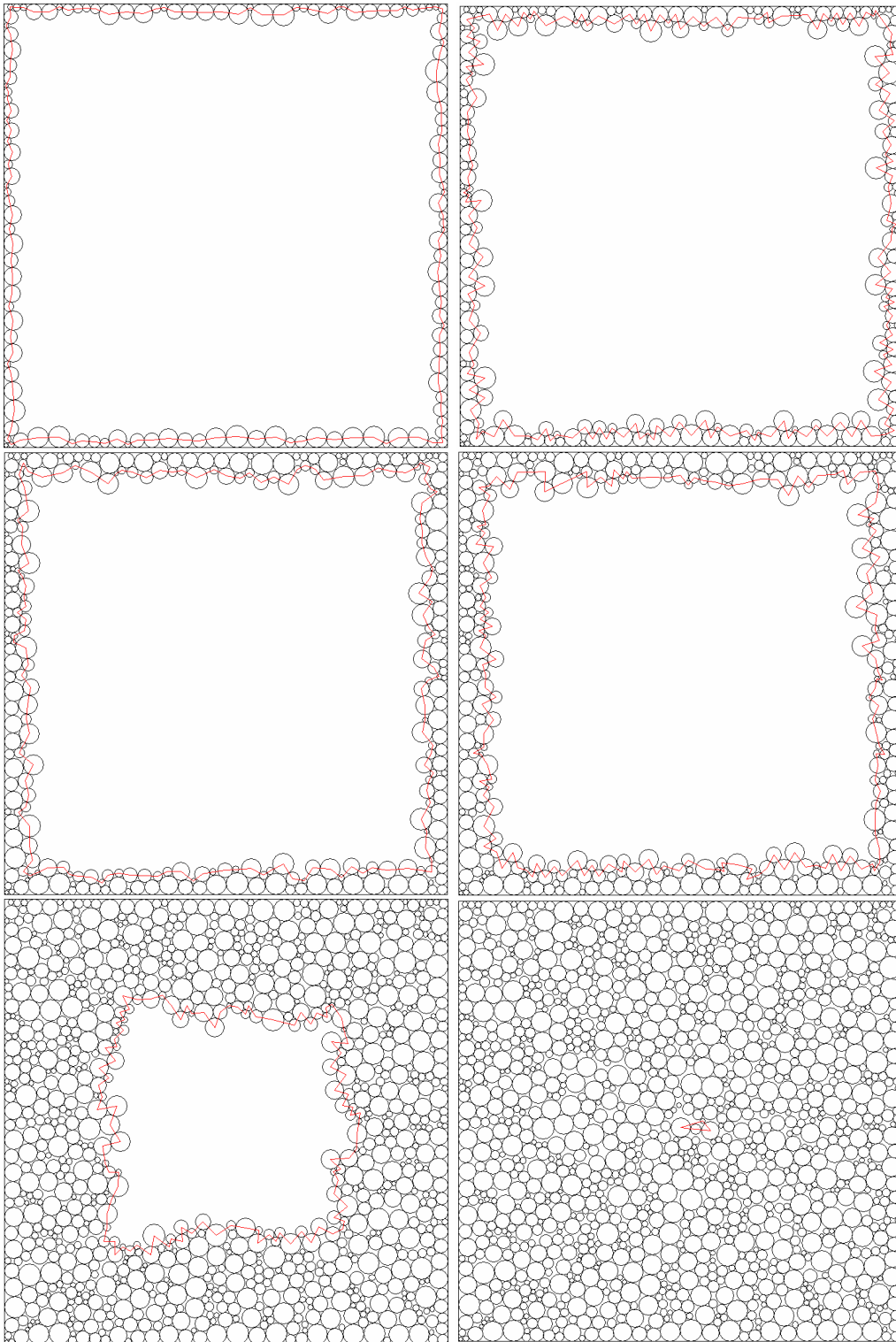


Figure 15. Illustration de quelques étapes de remplissage réalisé par notre algorithme.

III.3 Description détaillé de l'algorithme de remplissage

III.3.1 Construction du front initial

La première étape de notre algorithme de remplissage consiste à créer un front initial tangent à la frontière du domaine. Chaque disque constituant ce front est en contact avec la frontière du domaine ainsi qu'avec deux autres disques du front. Ces disques sont générés dans le sens trigonométrique comme indiqué par la Figure 16.

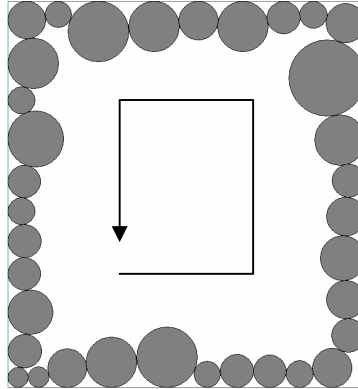


Figure 16. Exemple de disques d'un front initial.

Le front initial est donc un ensemble de segments, où chaque segment relie les centres de deux disques consécutifs (voir Figure 17). Ces segments sont orientés suivant une normale dirigée vers l'intérieur du domaine.

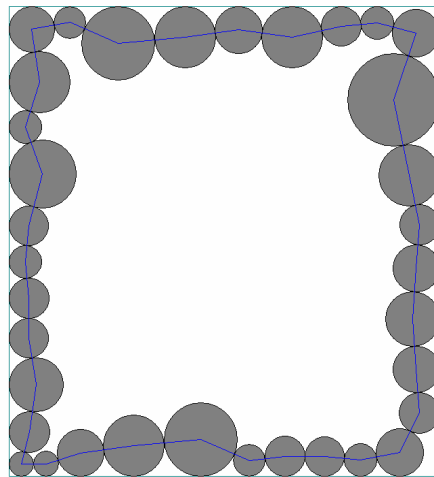


Figure 17. Exemple d'un front initial.

III.3.2 Choix du rayon du nouveau disque à générer

Chaque nouveau disque à générer doit avoir un rayon choisi d'une part aléatoirement, et d'autre part, de façon à respecter la distribution spécifiée. Cette distribution de tailles des grains est donnée par un histogramme associant des fréquences d'apparition aux intervalles de rayons de

grains. Ainsi, au $i^{ème}$ intervalle $[R_{1,i}, R_{2,i}[$ où $R_{1,i}$ et $R_{2,i}$ sont ses rayons extrêmes, est associée la probabilité P_i d'apparition d'un grain dont le rayon appartient à l'intervalle i , avec $\sum_i P_i = 1$.

Pour choisir un rayon de manière aléatoire, uniforme dans chaque intervalle, il suffit de déplier les segments de longueur P_i dans l'intervalle $[0, 1[$ et d'utiliser un générateur de nombre aléatoire uniforme dans $[0, 1[$ (voir Figure 18).

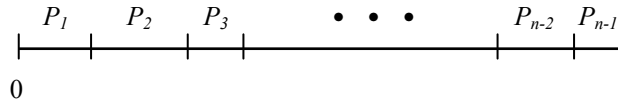


Figure 18 : Partitionnement du segment $[0, 1[$ avec les probabilités de la distribution spécifiée.

Ainsi, pour un nombre réel r choisi de manière aléatoire, il existe un intervalle $[P_1 + P_2 + \dots + P_{j-1}, P_1 + P_2 + \dots + P_j[$ contenant r et l'intervalle de rayons correspondant est $[R_{1,j}, R_{2,j}[$. Le rayon R du grain est donné par la relation :

$$R = R_{1,j} + r'(R_{2,j} - R_{1,j}) \quad (2)$$

où r' est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 qui peut être choisi comme égal à r .

Plusieurs tests (pour différentes distributions) ont été réalisés afin de vérifier la validité de cette méthode dans la génération de rayons conformes à la distribution spécifiée. Considérons la distribution donnée par la deuxième colonne du Tableau 1 avec un nombre de tirages $N = 1000$.

Intervalle	distribution d'origine	distribution résultante
1	0,15	0,147
2	0,2	0,205
3	0,1	0,093
4	0,05	0,0489
5	0,13	0,134
6	0,09	0,089
7	0,08	0,09
8	0,07	0,0649
9	0,05	0,0469
10	0,08	0,081

Tableau 1. Distributions d'origine et résultante de l'exemple étudié.

La Figure 19 montre les histogrammes de la distribution initiale spécifiée et de celle obtenue après un tirage utilisant la méthode décrite ci-dessus.

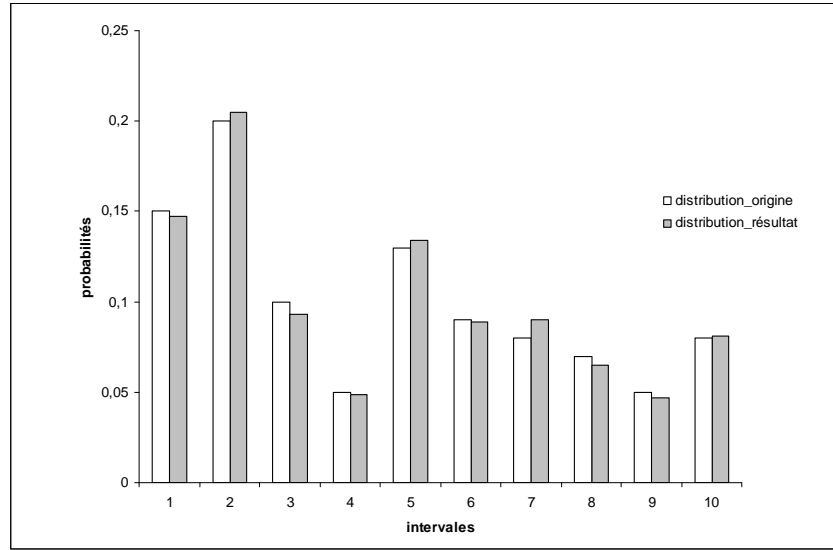


Figure 19. Comparaison entre la distribution d'origine et celle résultante.

III.3.3 Détection des conflits

Dans les algorithmes de génération de structures granulaires, l'analyse et la détection des intersections (conflits) constituent une tâche cruciale et souvent très coûteuse en temps de calcul. En effet, un nouveau disque est créé s'il n'est pas en conflit avec des disques existants ainsi qu'avec la frontière du domaine. Pour localiser la recherche des éventuelles intersections, on pourra utiliser une grille (selon le principe du *bucket sort*) dans laquelle les disques sont placés.

Soient a et b les largeur (x) et longueur (y) du domaine et R_{max} le plus grand rayon de la distribution spécifiée. La grille de localisation est un quadrillage en carrés de côté de longueur $2R_{max}$ couvrant le domaine. Si m et n représentent respectivement le nombre de carrés suivant l'axe x et l'axe y alors on a :

$$m = E\left(\frac{a}{2R_{max}}\right) + 1 \quad (3)$$

$$n = E\left(\frac{b}{2R_{max}}\right) + 1 \quad (4)$$

où E désigne la partie entière. La taille de chaque carré ($2R_{max}$) est définie de manière à limiter la recherche par voisinage au niveau 1 (comme on le verra plus loin).

Chaque disque créé est placé via son centre dans la grille (plus précisément dans le carré contenant son centre). Ainsi, pour qu'un nouveau disque soit validé :

1. Le carré (i, j) contenant son centre est localisé dans la grille.
2. Les disques (déjà créés) dont les centres sont contenus dans (i, j) et les carrés voisins dans l'ordre $(i+1, j)$, $(i, j+1)$, $(i-1, j)$, $(i, j-1)$, $(i+1, j+1)$, $(i-1, j+1)$, $(i-1, j-1)$ et $(i+1, j-1)$ sont identifiés.
3. Les conflits éventuels sont analysés et détectés.

7 $i-1, j+1$	3 $i, j+1$	6 $i+1, j+1$
4 $i-1, j$	1 i, j	2 $i+1, j$
8 $i-1, j-1$	5 $i, j-1$	9 $i+1, j-1$

Figure 20. Méthode de constitution de la liste des conflits éventuels, la case 1 correspond à la case (i, j) contenant le centre du nouveau disque.

Les tests de conflits se font avec les disques contenus dans les cases 1 à 9 dans l'ordre donné dans la Figure 20 pour optimiser la recherche. Lorsqu'un nouveau disque est accepté, la grille est actualisée en ajoutant ce disque à la liste de la case (i, j) contenant son centre.

III.3.4 Remplissage de l'intérieur

Le remplissage s'effectue front par front en commençant par le front initial dont le niveau est 0. Pour remplir le front de niveau n , l'algorithme comprend les étapes suivantes :

1. **Choisir un rayon.** Nous utilisons la méthode décrite précédemment. A l'itération k , la fonction choisissant le rayon n'est appelée que si le nouveau disque de l'itération $k-1$ est accepté. Le cas échéant, on garde le même rayon choisi précédemment.
2. **Choisir un élément du front.** L'élément choisi doit avoir un niveau inférieur ou égal à celui du front actuel. En effet, le niveau d'un front est défini par le niveau de son premier élément (segment) actif. Le niveau n_s d'un segment est défini par l'expression :

$$n_s = n_{d,1} + n_{d,2} \quad (5)$$

où $n_{d,1}$ et $n_{d,2}$ sont les niveaux des disques constituant le segment. Initialement, le niveau des disques du front initial est égal à 0 (voir ci-dessous pour le calcul du niveau d'un disque). Un segment actif ne peut être sélectionné que si son niveau est inférieur ou égal au niveau du premier segment actif du front actuel.

3. **Positionner le nouveau disque.** Le nouveau disque est positionné de façon à ce qu'il soit en contact avec les deux disques constituant le segment du front sélectionné.
4. **Analyser et détecter les conflits ou les intersections.** En utilisant la grille décrite dans la section III.3.3, les éventuels conflits entre le nouveau disque et les disques existants (déjà créés) ainsi que la frontière du domaine sont détectés. Si une partie ou la totalité du nouveau disque est à l'extérieur du domaine alors celui-ci est rejeté. Deux cas se présentent :
5. **Cas favorable : disque accepté.** Le disque ainsi positionné est créé et un niveau lui est attribué comme suit :

$$n_{d, \text{ nouveau disque}} = \min(n_{d,1}, n_{d,2}) + \max(1, \text{abs}(n_{d,1} - n_{d,2})) \quad (6)$$

où $n_{d,1}$ et $n_{d,2}$ sont les niveaux des disques constituant le segment du front par rapport auquel ce nouveau disque a été positionné et abs est la valeur absolue. Dans ce cas favorable, le segment du front par rapport auquel a été posé le nouveau disque devient inactif (en le supprimant du front) et deux nouveaux segments sont ajoutés au front tout en conservant le sens de l'orientation du front.

6. Cas défavorable. C'est le cas où le nouveau disque est en conflit avec des disques existants et/ou avec la frontière du domaine. Dans cette configuration, deux cas sont possibles :

- Il existe des segments actifs dont le niveau est inférieur ou égal à celui du front actuel, et par rapport auxquels le nouveau disque n'a pas encore été testé ou un disque avec un rayon inférieur ou égal au rayon de celui-ci. Dans ce cas, le premier dans la liste de ces segments est sélectionné et l'algorithme reprend à 3.
- Le cas échéant, le front est actualisé au niveau de son premier segment actif testé. Cette actualisation est basée sur un critère de distance. En effet, parmi tous les disques par rapport auxquels un conflit a été détecté (lorsque le premier segment actif du front actuel est sélectionné) on choisit le disque p_k vérifiant le critère :

$$\min_{i=1,\dots,m} (d(p_i, p_1) + d(p_i, p_2) - r_1 - r_2 - 2r_i) \quad (7)$$

où d est la distance euclidienne, m est le nombre de disques conflits, p_i est le disque conflit d'indice i , p_1, p_2 sont les disques constituant le premier segment actif du front actuel et r_1, r_2, r_i sont les rayons des disques p_1, p_2 et p_i respectivement. Ensuite, le segment p_1p_2 actuel est désactivé et les segments p_1p_k et p_kp_2 sont ajoutés au front, s'ils n'existent pas déjà, et désactivés (supprimés) sinon.

Les figures 21 et 22 illustrent les différentes étapes de l'algorithme du remplissage de l'intérieur. La Figure 21 montre une suite de tentatives pour insérer un nouveau disque (disque en noir) en utilisant les segments du front initial. Dans la Figure 21-c, le disque est accepté (par le troisième segment actif du front initial) et le front est actualisé.

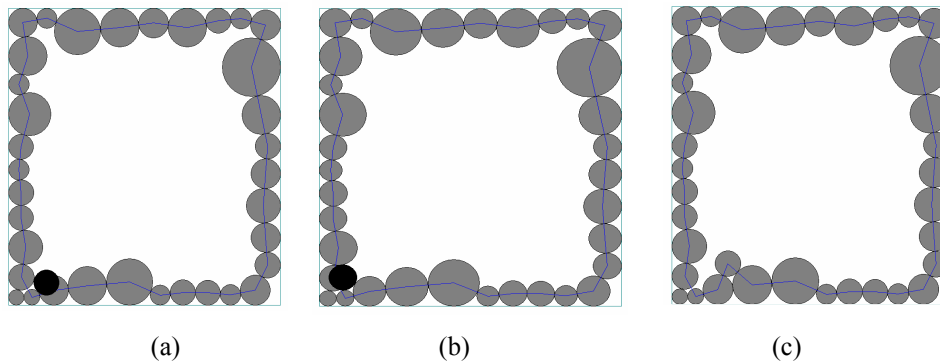


Figure 21. (a) Premier segment sélectionné, disque rejeté et passage au segment suivant.
 (b) Deuxième segment testé, disque rejeté et passage au segment suivant.
 (c) Disque accepté et actualisation du front.

La Figure 22 schématise le critère de distance pour détecter le disque p_k décrit dans le cas défavorable de l'algorithme 1 ci-dessus.

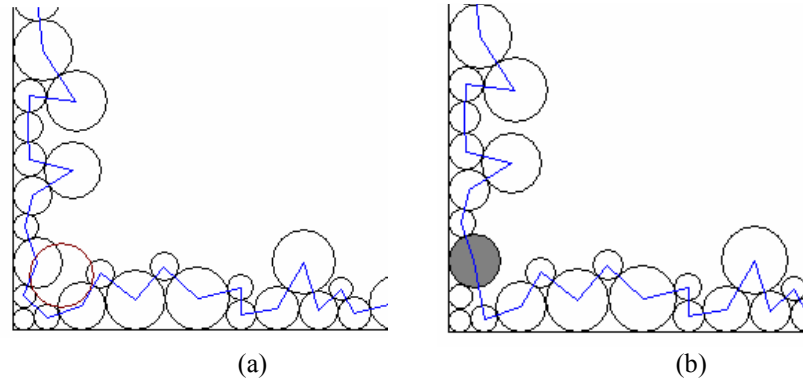


Figure 22. (a) Détection des conflits entre le nouveau disque (en rouge) et des disques existants lorsque le premier segment actif du front est sélectionné (cas défavorable de l'algorithme 1). (b) Le disque plein (en gris) est le disque p_k du critère de distance de l'équation 5, et le front est actualisé en désactivant deux segments existants et en y ajoutant un nouveau.

III.4 Exemple d'application

On considère l'exemple d'une nanostructure de fer pur [3]. Dans ce cas, le domaine d'étude est un rectangle de dimensions 237×300 nm, et la distribution de grains obtenue contient 12 intervalles donnés par le Tableau 2.

Rayons (nm)	Probabilités
$[2 - 2,5[$	0,15801024
$[2,5 - 3[$	0,20994879
$[3 - 3,5[$	0,20994879
$[3,5 - 4[$	0,16605706
$[4 - 4,5[$	0,09802487
$[4,5 - 5[$	0,06730066
$[5 - 5,5[$	0,0380395
$[5,5 - 6[$	0,02926116
$[6 - 6,5[$	0,00731529
$[6,5 - 7[$	0,00658376
$[7 - 7,5[$	0,00658376
$[7,5 - 8[$	0,00292612

Tableau 2. Distribution de la nanostructure du fer pur.

Pour cet exemple, le joint de grain est défini sous la forme :

$$jg(r) = \frac{2}{r} \quad (8)$$

où r est un rayon quelconque de la distribution spécifiée. Dans ces conditions, nous obtenons une structure avec 987 disques, une densité de 0.80 et un temps de calcul inférieur à 0.01 s. On peut remarquer que le remplissage est assez rapide et que la densité est très satisfaisante. Par ailleurs, la Figure 23 montre la comparaison entre les distributions d'origine et résultante.

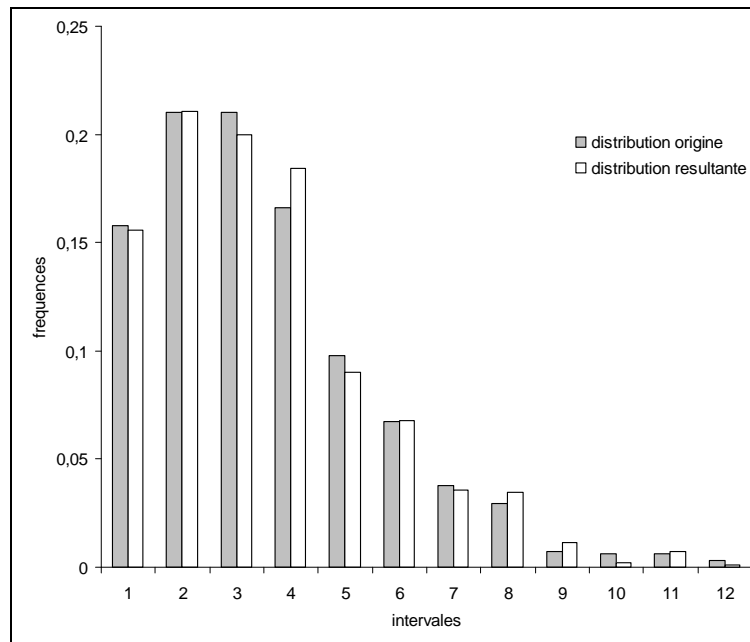


Figure 23. Comparaison des distributions d'origine et résultante.

On remarque une très faible différence entre les deux distributions. La Figure 24 montre la structure modélisée par notre algorithme.

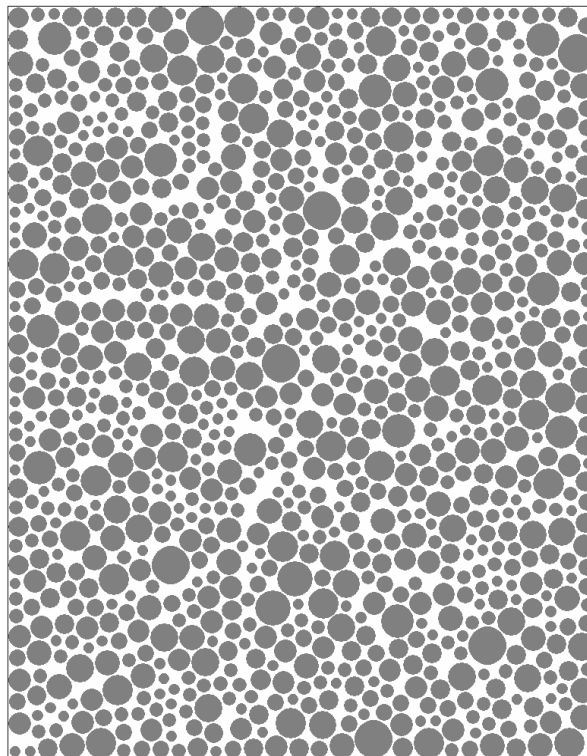


Figure 24. La structure générée du fer pur nanostructuré : les disques représentent les grains et les espaces entre ceux-ci les joints de grains.

III.5 Comparaison avec des méthodes existantes

Nous comparons notre méthode avec la méthode dynamique "le réarrangement collectif" de Lubachevsky et Stillinger [5] et la méthode constructive "*the inwards packing method*" de Bagi [7]. Pour effectuer cette comparaison, on considère le modèle de Bagi [7] :

- Distribution : $r_{min} = 0.06$, $r_{max} = 0.42$ avec une probabilité uniforme.
- Domaine à remplir : 100×100 .

Le nombre de particules à générer est a priori connu comme imposé par le modèle du réarrangement collectif. Il s'agit de 39000 particules, et nous comparons la densité et le temps de calcul nécessaire à chaque algorithme (Tableau 3).

	Machine utilisée	Densité	Temps de calcul [s]
Lubachevsky et al	IBM PC, 3 GHZ, Pentium 4	0.84	Heures
Bagi	IBM PC, 3 GHZ, Pentium 4	0.82	180 s
Notre algorithme	Dell Portable, 1.4 GHZ, Pentium M	0.84	6 s

Tableau 3. Comparaison de notre algorithme avec des méthodes existantes.

Notre algorithme donne les meilleurs résultats concernant la densité, avec un temps de calcul beaucoup plus court que les deux autres méthodes tout en vérifiant la distribution imposée. Par rapport au modèle de Bagi [7], compte tenu des processeurs utilisés, notre algorithme est au moins 30 fois plus rapide (voir Tableau 3). Ceci est dû au fait que la sélection des segments dans notre cas est automatique, alors que dans le cas de Bagi [7], pour chaque nouvelle particule, on cherche (et souvent on construit) le segment idéal.

En résumé, le modèle frontal donne des résultats satisfaisants par rapport aux objectifs et aux contraintes de la modélisation géométrique des structures granulaires. Mais nous avons remarqué qu'il présente un inconvénient par rapport à la répartition du vide dans la structure. En effet, on constate une concentration des espaces vides au voisinage des collisions des fronts. Pour pallier cet inconvénient, nous proposons un algorithme d'optimisation que nous allons détailler dans la section suivante.

IV. Optimisation ou équilibrage de la structure

Le remplissage par la méthode frontale conduit souvent à une hétérogénéité de la densité locale dans la structure (des endroits plus denses que d'autres, voir Figure 25). Ce phénomène peut avoir une incidence directe sur les résultats physiques des simulations des structures granulaires. En effet, dans une nanostructure, un vide est considéré comme un joint de grain (supplémentaire). Or la proportion et la distribution de ces joints de grains dans une telle structure sont des caractéristiques principales de son comportement (obstacles à la propagation des dislocations par exemple). Pour avoir le moins d'incidences possibles, cet espace vide doit être équiréparti sur l'ensemble de la structure.

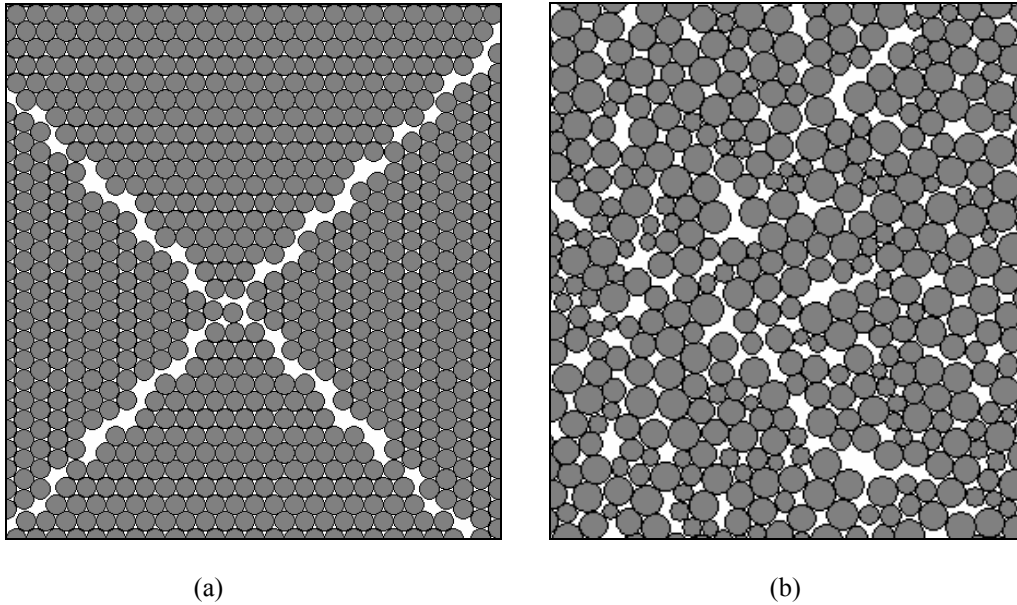


Figure 25. Extraits de structures générées par notre algorithme de remplissage, (a) cas d'un rayon fixe, (b) cas de rayons variables.

Nous partons du principe que *"pour bien répartir le vide dans toute la structure, il suffit de bien le répartir localement autour de chaque particule"*. Ainsi, nous avons besoin de connaître la configuration locale autour de chaque point (centre de particule), c'est à dire les positions et les rayons des particules voisines. Pour cela, nous utilisons la triangulation de Delaunay pondérée TDP (le dual du diagramme de Laguerre) du nuage de points constitué des centres des particules. La Figure 26 montre des extraits de triangulation de structures avec des disques de rayon fixe et des disques de rayons variables.

Cet équilibrage de la structure doit être caractérisé par un critère qui permet de mesurer la pertinence de l'optimisation dans la répartition de l'espace vide dans toute la structure. Nous proposons ci-dessous un critère de qualité, et nous l'utilisons pour comparer deux méthodes d'optimisation. La première est la méthode du lissage *"Laplacian smoothing"* utilisée généralement pour lisser les longueurs des arêtes dans un maillage, et la seconde est une nouvelle méthode que nous proposons, basée sur une relocalisation de points sous contraintes.

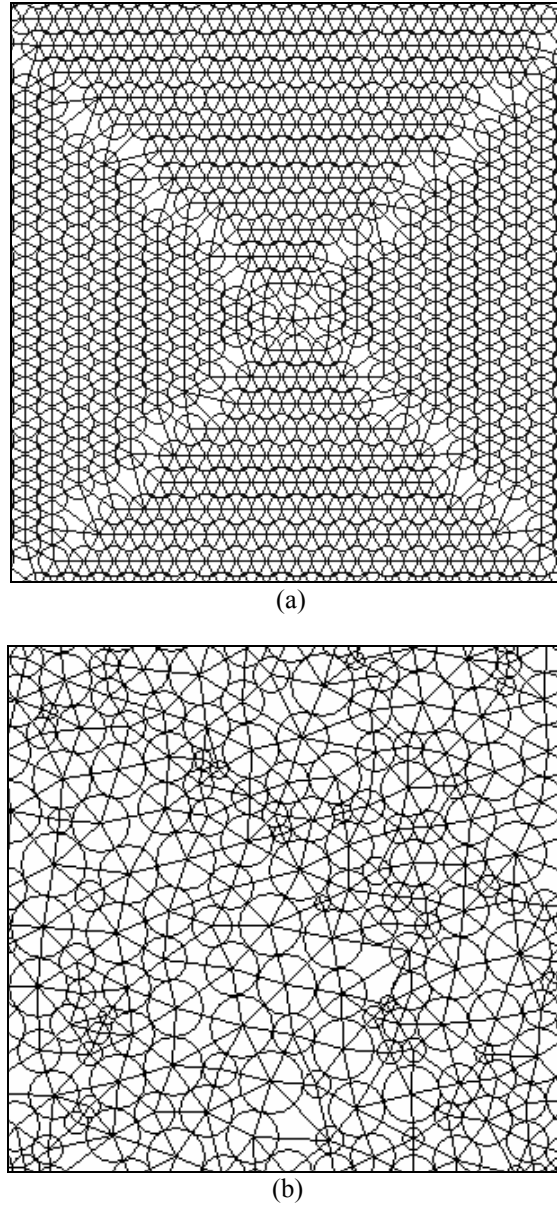


Figure 26. Triangulations de Delaunay pondérée, (a) cas d'un rayon fixe (triangulation de Delaunay), (b) cas de rayons variables.

IV.1 Critère de qualité

Il s'agit d'un critère qui nous permet de caractériser la qualité (ou efficacité) d'un algorithme d'optimisation ou d'équilibrage. Ce critère, étant local, nécessite la donnée de la TDP du nuage de points constitué des centres de particules. À chaque point p de la TDP (sauf les points du bord) est associé une fonction $F(p)$ définie par :

$$F(p) = \max_{i=1,\dots,n} (h_{p_i}^p) - \min_{i=1,\dots,n} (h_{p_i}^p) \quad (9)$$

où n est le nombre de points adjacents au point p , et $h_{p_i}^p$ est défini par l'équation suivante :

$$h_{p_i}^p = d(p_i, p) - r_{p_i} - r_p \quad (10)$$

où d est la distance euclidienne entre le point p_i et le point p , et r_{p_i} et r_p sont les rayons des disques associés aux centres p_i et p . Les quantités $h_{p_i}^p$ sont représentées dans la Figure 27 par des traits pleins et représentent les tailles des joints de grains selon toutes les directions.

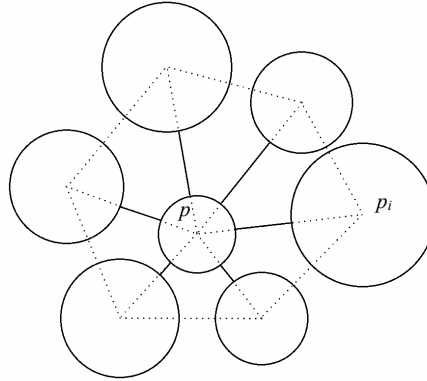


Figure 27. Illustration du critère de qualité pour un algorithme d'optimisation. En pointillé la boule du point p extraite de la TDP, en traits pleins les quantités $h_{p_i}^p$.

En minimisant la fonction $F(p)$, le maximum et le minimum des $h_{p_i}^p$ tendent vers une valeur moyenne h_{moy}^p et ainsi l'équilibrage est réalisé.

Pour présenter les résultats de l'application de ce critère, on montrera le graphe de F entre F_{min} (le minimum de $F(p)$) et F_{max} (le maximum de $F(p)$) sous forme d'un histogramme sur dix intervalles $\left[F_{min} + i \frac{F_{max} - F_{min}}{10}, F_{min} + (i+1) \frac{F_{max} - F_{min}}{10} \right]$ pour $i=0, \dots, 9$.

Dans les sections suivantes, nous exposons les essais que nous avons effectués pour corriger les structures générées et nous justifions la nécessité de développer un nouvel algorithme d'optimisation.

IV.2 Les essais et l'algorithme proposé

Il s'agit de définir un algorithme qui répond aux contraintes suivantes :

- efficacité (rapidité et robustesse),
- conservation de la structure (non-intersections entre les disques),
- généralisation en trois dimensions.

L'algorithme est efficace si l'espace vide est équilibré sur toute la structure ou encore si $F(p)$ atteint un minimum global. En outre cet équilibrage ne doit pas produire des intersections entre les disques et conserver ainsi la structure. Par ailleurs il est souhaitable qu'il soit généralisable en 3D.

Nous considérons l'exemple d'une structure composée de grains de rayon identique R . Dans un premier temps, nous avons appliqué la méthode du lissage basée sur le laplacien "*Laplacian smoothing*". Cette méthode semble équilibrer les longueurs d'arêtes de la triangulation de Delaunay du nuage de centres des disques.

IV.2.1 "*Laplacian smoothing*"

Le principe de cette méthode est de déplacer chaque point pas à pas vers le barycentre des points voisins. L'algorithme de cette méthode est décrit dans le schéma suivant :

Tant qu'il existe des points relocalisés faire :
pour chaque point interne p :
 - définir la boule de p (les points voisins) via la triangulation de Delaunay,
 - calculer le barycentre p^* des points de la boule,
 - remplacer p par $0.7p + 0.3p^*$,
fin de la boucle sur les points p ,
basculer éventuellement les arêtes pour rendre la triangulation de Delaunay,
Fin du Tant que.

Algorithme 2. Algorithme du lissage.

La Figure 28 illustre les structures granulaires avec les triangulations correspondantes avant et après l'application de l'algorithme du lissage (Algorithme 2).

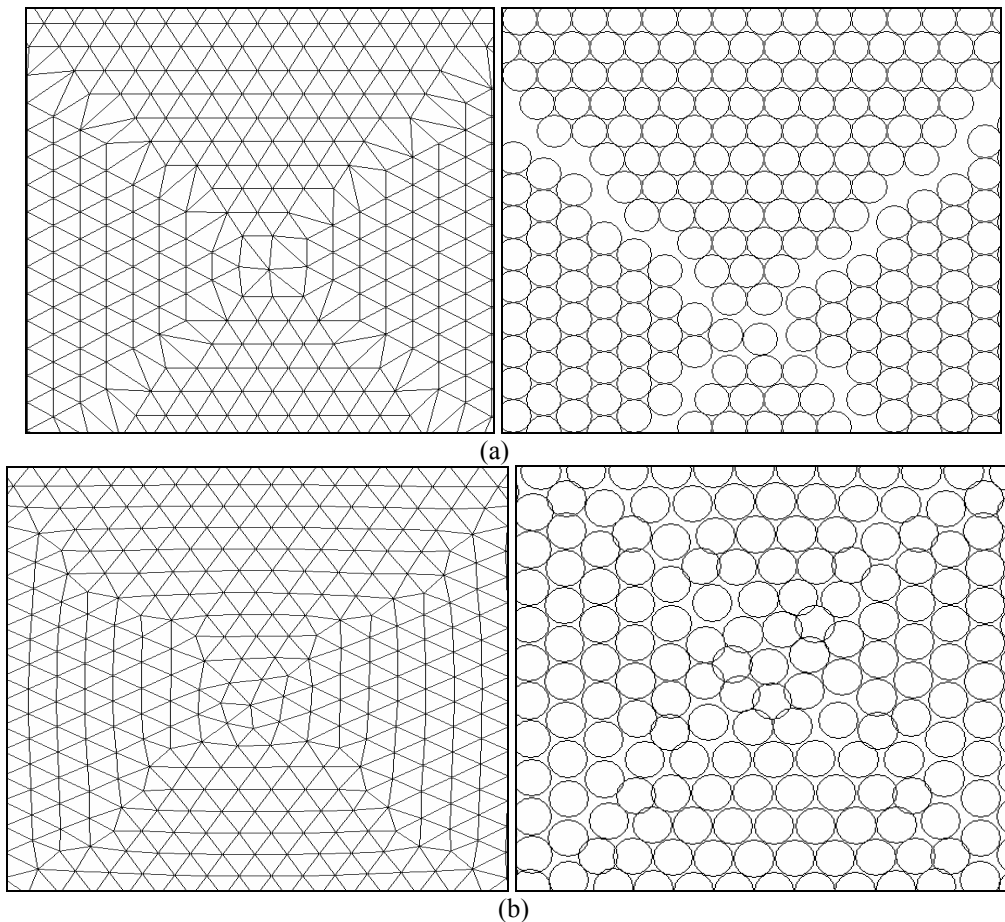


Figure 28. La structure granulaire à droite et la triangulation à gauche, a) avant, (b) après l'application de l'algorithme du lissage.

Dans plusieurs tests (avec des grains de rayon constant R), l'algorithme du lissage produit des triangulations dont une grande partie des arêtes ont des longueurs strictement inférieures à $2R$. Ce résultat signifie (comme le montre la Figure 28-b) la présence d'intersections entre les disques. Dans le cas des structures granulaires étudiées dans notre cas, cette situation n'est pas admissible.

Nous avons effectué aussi des tests avec une variante de l'Algorithme 2. En effet, nous avons introduit la contrainte de non intersections entre les disques. Avec cette contrainte, l'algorithme du lissage perd son efficacité et la structure garde de grandes disparités au niveau de la répartition du vide (Figure 29).

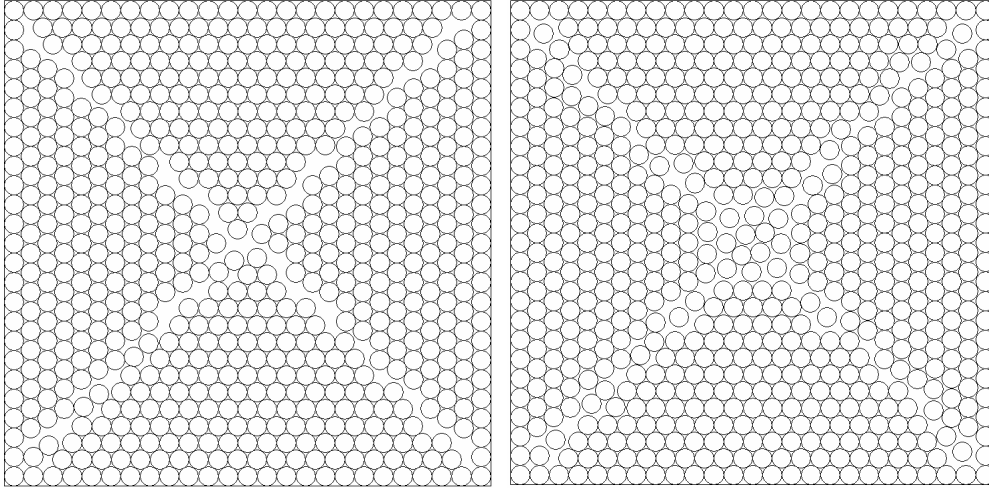


Figure 29. La structure granulaire : à gauche avant optimisation et à droite après l'application de l'algorithme du lissage sous contrainte.

Concernant ce dernier algorithme de lissage, les histogrammes décrivant la répartition des fonctions $F(p)$ avant et après optimisation sont donnés respectivement dans les figures 30 et 31.

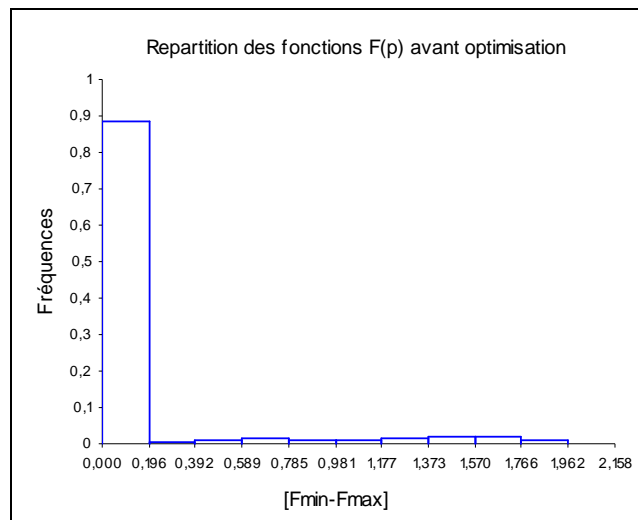


Figure 30. Histogrammes avant optimisation.

On remarque que 88% de la structure présente un équilibre parfait (valeur de $F(p)$ très proche de F_{min} qui vaut 0). Ce constat est très visible dans la Figure 29 (avant optimisation) dans les parties non diagonales de la structure. On remarque aussi une grande ressemblance entre les deux répartitions (Figure 30 et Figure 31). L'étendue de l'intervalle $[F_{min}, F_{max}]$ est légèrement plus petite après optimisation avec une F_{max} qui passe de la valeur 1.962 à 1.870 et une F_{min} qui reste constante et qui vaut 0.

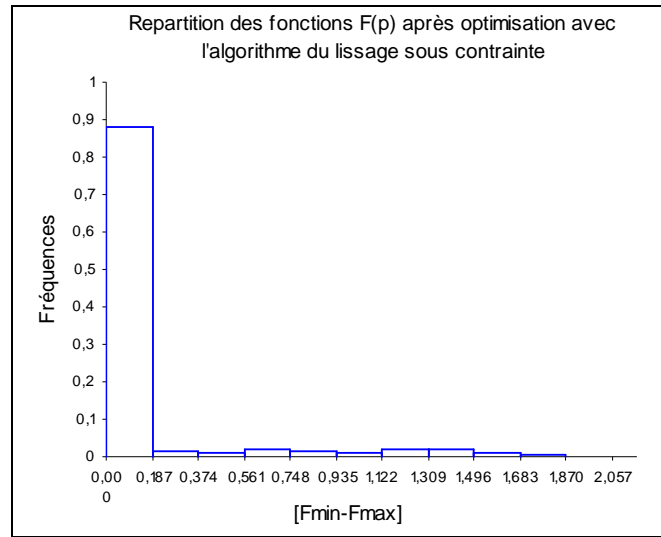


Figure 31. Histogrammes après optimisation avec l'algorithme du lissage sous contrainte.

Ces résultats confirment la nécessité de développer un nouvel algorithme plus adapté à notre cas d'étude avec une efficacité améliorée.

IV.2.2 Notre algorithme d'optimisation

L'idée principale consiste à considérer la boule de chaque point p et de repositionner ce point par rapport au front défini par tous les segments frontaliers de sa boule.

Si s_i représente le $i^{\text{ème}}$ segment frontalier de la boule de p , centre d'un disque de rayon r , alors il existe une position unique p_i de ce disque positionné (tangent aux disques représentés par s_i) par rapport à s_i . La nouvelle approche consiste à déplacer pas à pas le point p vers le barycentre p^* des points p_i valides (qui ne sont pas en conflit avec des disques existants).

Les différentes étapes de notre algorithme sont données dans le schéma suivant :

Tant qu'il existe des points relocalisés faire :

pour chaque point interne p :

- définir la boule de p (les points voisins) via la triangulation de Delaunay,
- calculer les points p_i associés aux segments frontaliers s_i de la boule de p ,
- calculer le barycentre p^* des points p_i valides,
- boucle sur les éventuelles positions de p ($w = 0.3$ à 0.05 par pas de -0.05)
 - $p_w = (1-w)p + wp^*$
 - contrôle de la nouvelle position p_w ,
 - si cette position est valide (aucun conflit) alors sortir de la boucle sur w ,
- fin de la boucle sur w ,

fin de la boucle sur les points p ,

basculer éventuellement les arêtes pour rendre la triangulation de Delaunay.

Fin du Tant que.

Algorithme 3. Le schéma de notre algorithme d'optimisation.

Les figures suivantes schématisent les différentes étapes de l'Algorithme 3 en suivant l'évolution d'un point p .

a) détermination de la boule du point p

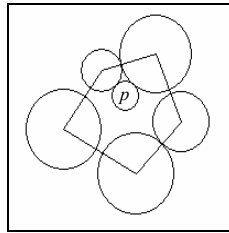


Figure 32. Configuration initiale et boule du point p .

b) calcul de toutes les positions p_i

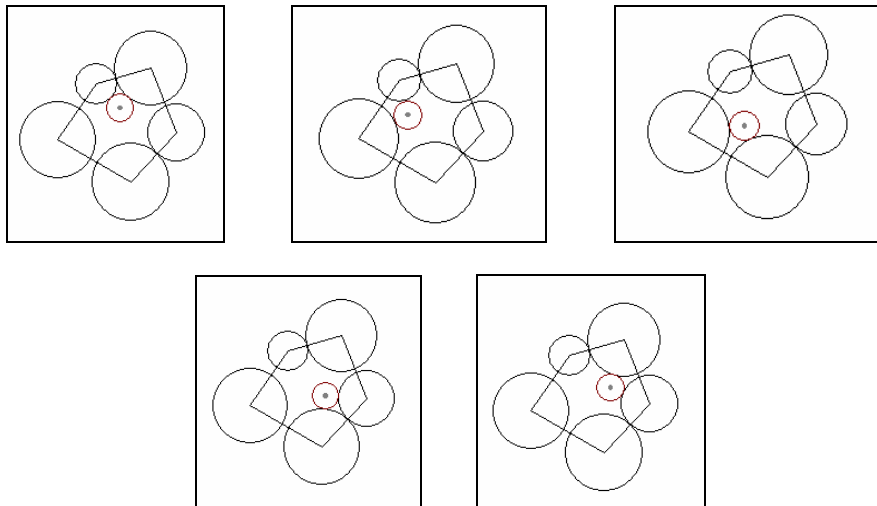


Figure 33. Calcul des positions p_i .

c) calcul du barycentre p^* des positions p_i valides

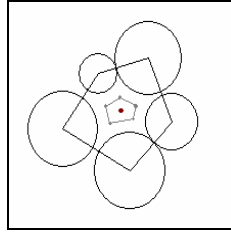


Figure 34. Calcul du barycentre p^* (point en rouge sur la figure).

d) Suivi du point p à travers les différentes itérations du repositionnement global

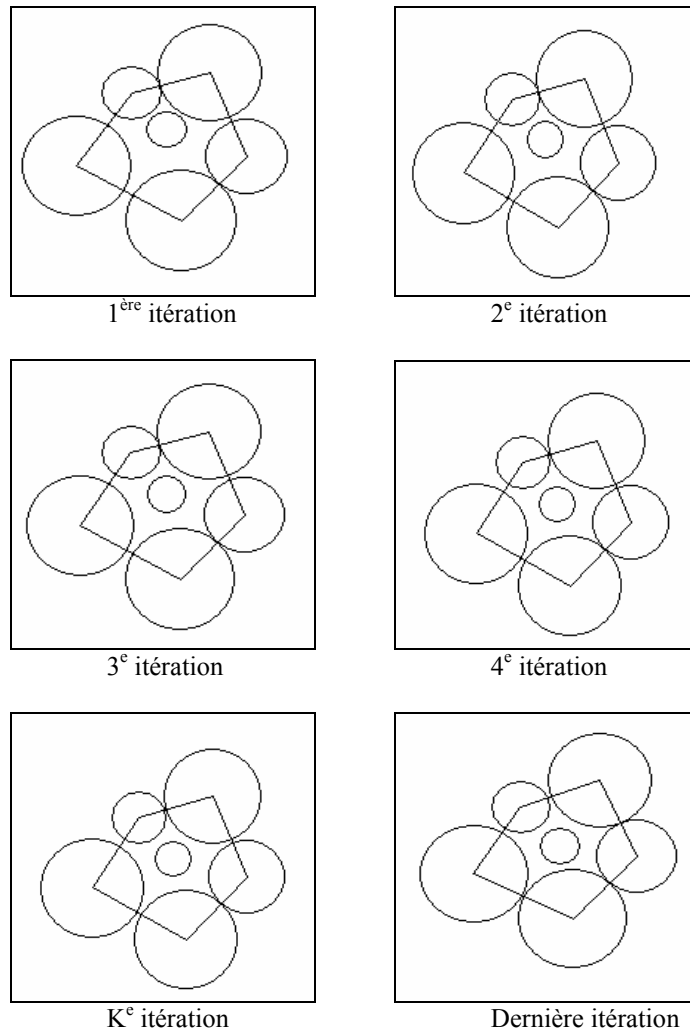


Figure 35. Évolution du point p , la dernière itération correspond au cas $p = p^*$.

Pour voir l'amélioration que notre algorithme apporte à une structure granulaire, nous présentons dans la Figure 36 le cas d'un rayon fixe (avec les triangulations correspondantes).

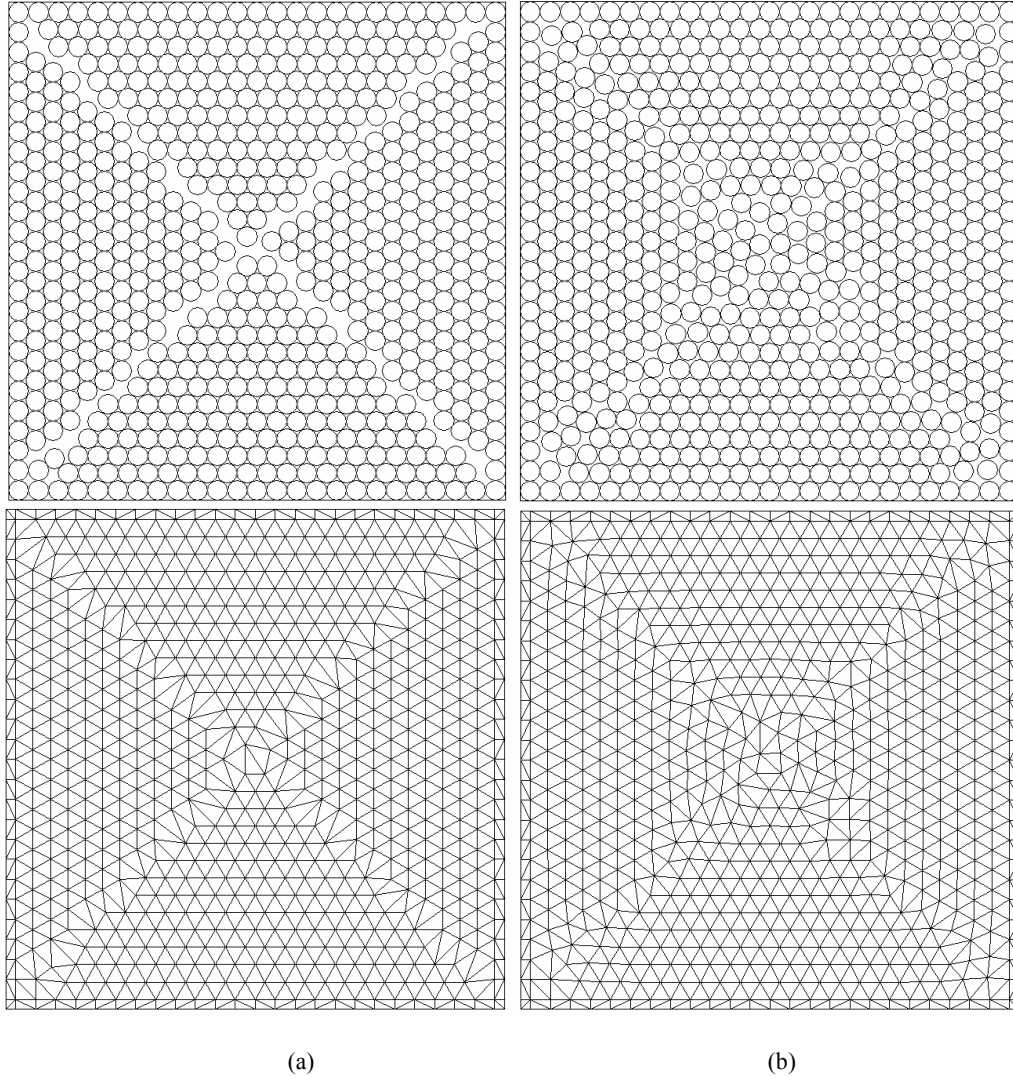


Figure 36. Structure granulaire et triangulation correspondante, a) avant, b) après l'application de notre algorithme d'optimisation dans le cas d'un rayon fixe.

Nous avons choisi le cas d'un rayon fixe pour illustrer les améliorations apportées par notre algorithme, car c'est dans ce cas que le défaut de la méthode frontale est le plus visible. On constate l'efficacité de notre algorithme même dans ce cas de configuration. En appliquant le critère de qualité introduit dans la section IV.1, on obtient les résultats présents dans la Figure 37.

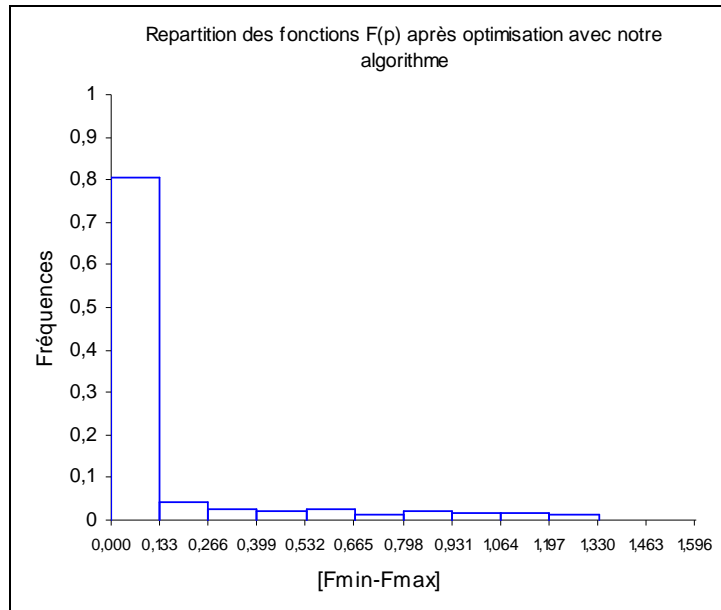


Figure 37. Histogrammes après optimisation avec notre algorithme.

On remarque une nette diminution de l'étendue de l'intervalle $[F_{min}, F_{max}]$ entre la configuration avant optimisation (Figure 30) et celle après optimisation en utilisant le nouvel algorithme, avec une F_{max} qui passe de 1.962 à 1.33 (au lieu de 1.87 dans le cas de l'algorithme du lissage sous contrainte). La répartition reste identique avec une grande partie des points de la structure dont la fonction $F(p)$ est très proche de la valeur F_{min} . On peut aussi remarquer qu'ils subsistent toujours des points dont la fonction F est loin de F_{min} . En effet pour ces points, la contrainte de non intersections entre les disques empêche l'algorithme de les faire déplacer. Ainsi, au bout de quelques itérations ces points se figent, conduisant ainsi à un certain verrouillage de la structure. Dans le cas de rayons variables, notre algorithme améliore aussi (voir Figure 38) l'équilibrage de la structure mais le résultat est moins visible que dans le cas d'un rayon fixe.

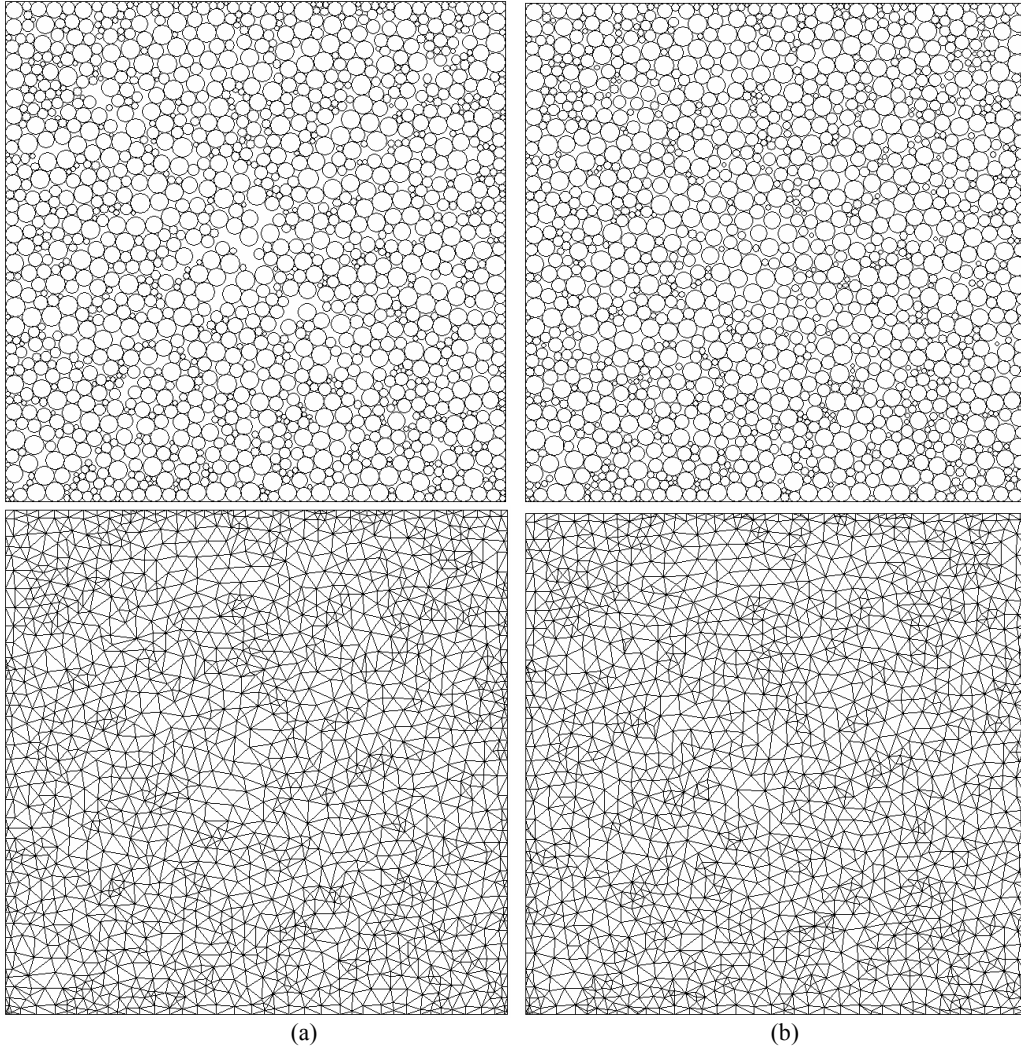


Figure 38. Structure granulaire et triangulation correspondante, a) avant, b) après l'application de notre algorithme d'optimisation dans le cas de rayons variables.

V. Construction des cellules de Laguerre

Dans cette section, nous rappelons la définition du diagramme de Laguerre (ou de puissance) d'un nuage de points et nous présentons une méthode simple pour transformer la structure granulaire en disques en une structure avec des grains polygonaux (plus proches de la réalité).

V.1 Triangulation de Delaunay pondérée et diagramme de Laguerre

Soient S un nuage de points de \mathbb{R}^2 et W un ensemble de scalaires positifs associés à ce nuage de points. La triangulation de Delaunay "pondérée" du nuage de points S muni de l'ensemble de poids W est une triangulation de S telle que les disques "circonsrits" aux triangles sont vides. Dans le cas d'un nuage de points pondérés, la distance d'un point x à un point p du nuage est définie par :

$$d(x, p) = \sqrt{\pi_p(x)} \quad (11)$$

avec
$$\pi_p(x) = \|px\|^2 - w^2 \quad (12)$$

représentant la puissance de x par rapport à p , w est le poids associé à p et $\|px\|$ est la distance euclidienne de x à p . La distance pondérée $d(x,p)$ peut être géométriquement interprétée comme la distance du point x à un point M sur le cercle C de centre p et de poids w tel que la droite (xM) est tangente à C en M (voir Figure 39).

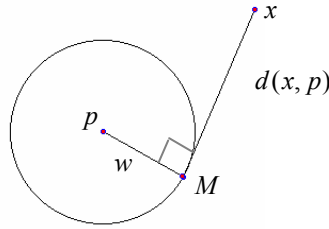


Figure 39. Schématisation de la distance pondérée $d(x,p)$.

Ainsi, pour un triangle constitué des points p_1, p_2 et p_3 du nuage, le centre o du cercle circonscrit (par rapport à la distance pondérée) vérifie :

$$\begin{aligned} \|p_1o\|^2 - w_1^2 &= \|p_2o\|^2 - w_2^2 \\ \|p_1o\|^2 - w_1^2 &= \|p_3o\|^2 - w_3^2 \end{aligned} \quad (13)$$

où w_i est le poids du point p_i .

Le dual de la triangulation de Delaunay pondérée de S est un diagramme constitué de polygones, appelé diagramme de Laguerre ou de puissance de S . La dualité fait correspondre les triangles de la triangulation aux centres des cercles circonscrits à ces triangles représentant les sommets du diagramme. De même, chaque côté d'un polygone du diagramme représente un couple de triangles adjacents de la triangulation. Ainsi, pour construire le diagramme de Laguerre de S , nous proposons de générer la triangulation de Delaunay pondérée de S et de considérer son dual. Dans le cas particulier où tous les points de S ont un poids identique, la triangulation est de Delaunay et son dual est le diagramme de Voronoï.

Dans le cas d'une structure granulaire, les points du nuage sont les centres des grains représentés par des disques et, pour prendre en compte la taille de ces grains, on associe à chaque centre de disque un poids w défini par :

$$w = r + jg(r) \quad (14)$$

où r est le rayon du disque et $jg(r)$ l'épaisseur du joint de grain correspondant. Ainsi, pour transformer l'assemblage des disques constituant la structure granulaire en un assemblage de polygones, il suffit de construire la triangulation de Delaunay pondérée des centres des disques (grains) munis de leurs poids définis précédemment et de considérer son dual. La Figure 40 montre la triangulation de Delaunay pondérée des centres des disques d'une structure granulaire ainsi que son dual, le diagramme de Laguerre correspondant.

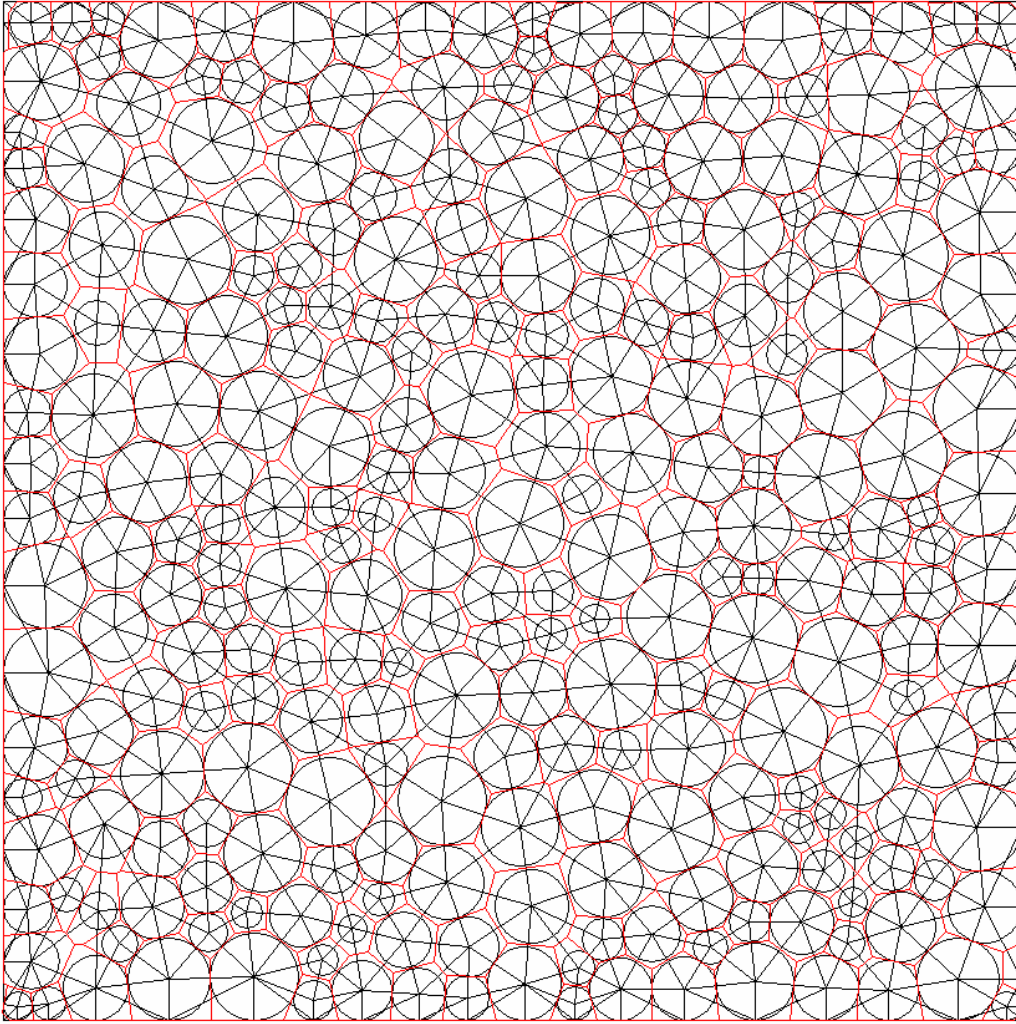


Figure 40. Triangulation Delaunay pondérée (triangles en noir) et son dual le diagramme de Laguerre (en rouge).

V.2 Rétrécissement des cellules

Dans le diagramme établi dans la section précédente, les joints de grains sont inclus dans les cellules. Pour dissocier les joints de grains, ces cellules doivent être homothétiquement rétrécies. Ainsi, à partir des sommets o_i d'une cellule et du point p centre du grain (disque) correspondant, on définit les sommets \tilde{o}_i de la cellule rétrécie par la formule suivante :

$$\tilde{o}_i = o_i + (1 - \frac{r}{w}) \overrightarrow{o_i p} \quad (15)$$

où r est le rayon du grain et w le poids de celui-ci (comme formulé ci-dessus). La Figure 41 schématise le rétrécissement d'une cellule utilisant cette formulation.

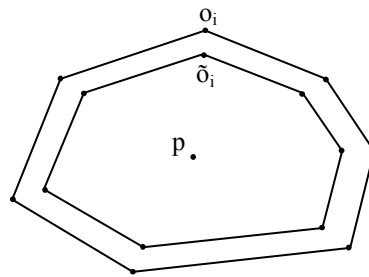


Figure 41. Schématisation du rétrécissement d'une cellule.

La Figure 42 montre les cellules après rétrécissement du diagramme de Laguerre de la Figure 40.

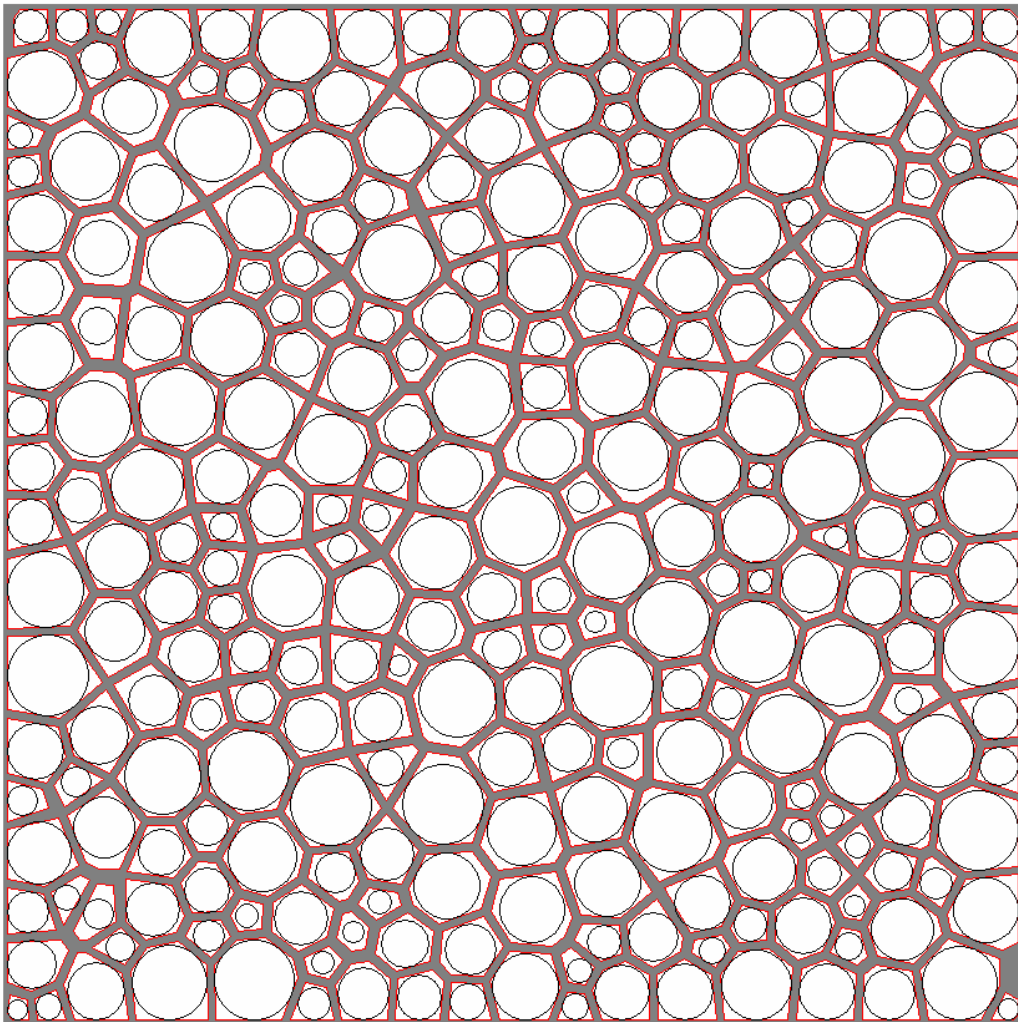


Figure 42. Rétrécissement des cellules (en rouge) et dissociation des joints de grains (bandes en gris).

Remarquons que chaque cellule (rétrécie) contient entièrement un disque, et ainsi l'aire de la cellule est toujours supérieure à celle du disque inclus. En effet, dans la procédure de remplissage, les épaisseurs des joints de grains sont comprises dans les rayons des disques, et malgré cela il subsiste toujours un espace vide intrinsèque à la modélisation considérée (des grains par des disques). Cet espace, qui n'a pas de sens physique car inexistant dans la vraie structure (modèle obtenu expérimentalement), est équitablement réparti sur la structure générée selon l'un des deux modèles présentés dans ce rapport. Soit le modèle avec les disques où la taille des grains est conservée et l'épaisseur des joints de grains est légèrement augmentée, soit le modèle avec les cellules polygonales où la taille des grains est légèrement augmentée et l'épaisseur des joints de grains est conservée.

VI. Applications

Nous considérons deux exemples numériques, un premier avec des grains de rayon ou de taille fixe et un deuxième avec des grains de rayons variables.

Cas du rayon fixe. Nous considérons un domaine de dimensions 100×100 nm avec des disques de rayon 0.9 nm et un joint de grain constant de 0.1 nm.

Dans ce cas, l'assemblage est généré en 0.04 s et comprend **2789** disques (Figure 43).

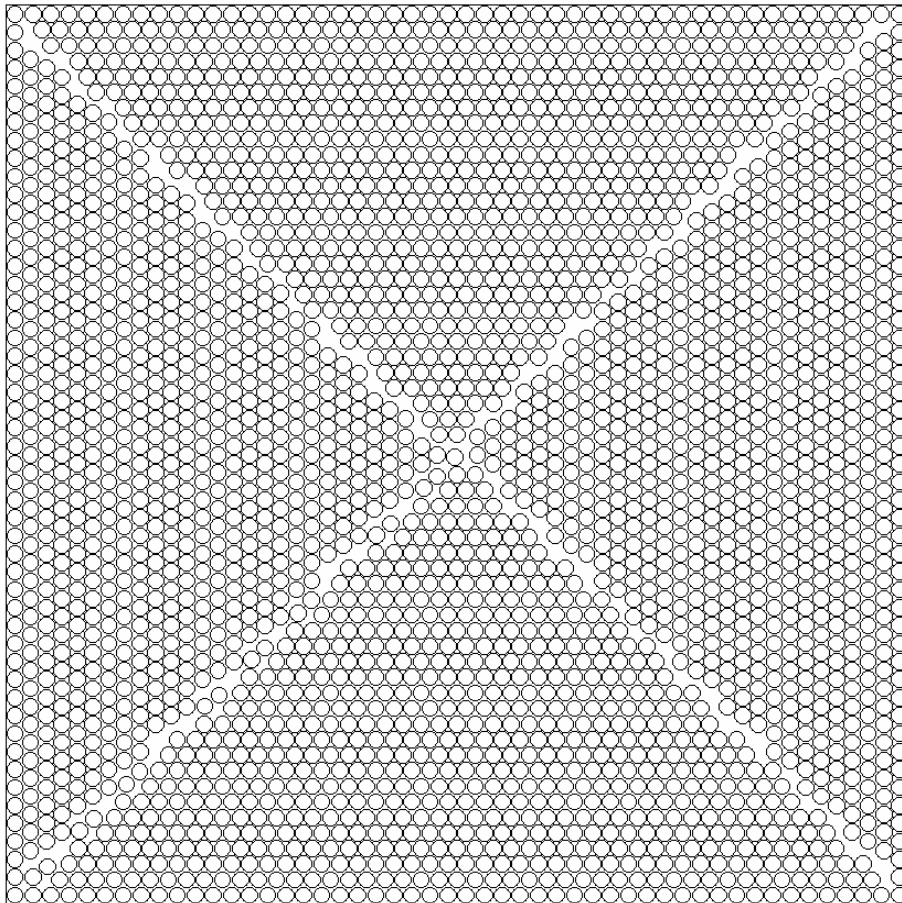


Figure 43. Structure générée dans le cas d'un rayon fixe.

La densité ou le taux de remplissage est de **0.8762** en sachant que la densité théorique maximale en deux dimensions (avec rayon fixe) est de **0.9069**. Cette densité nous semble raisonnable.

Comme indiqué précédemment, on remarque une mauvaise répartition de l'espace vide dans la structure (ici suivant les diagonales). La Figure 44 montre cet assemblage après équilibrage.

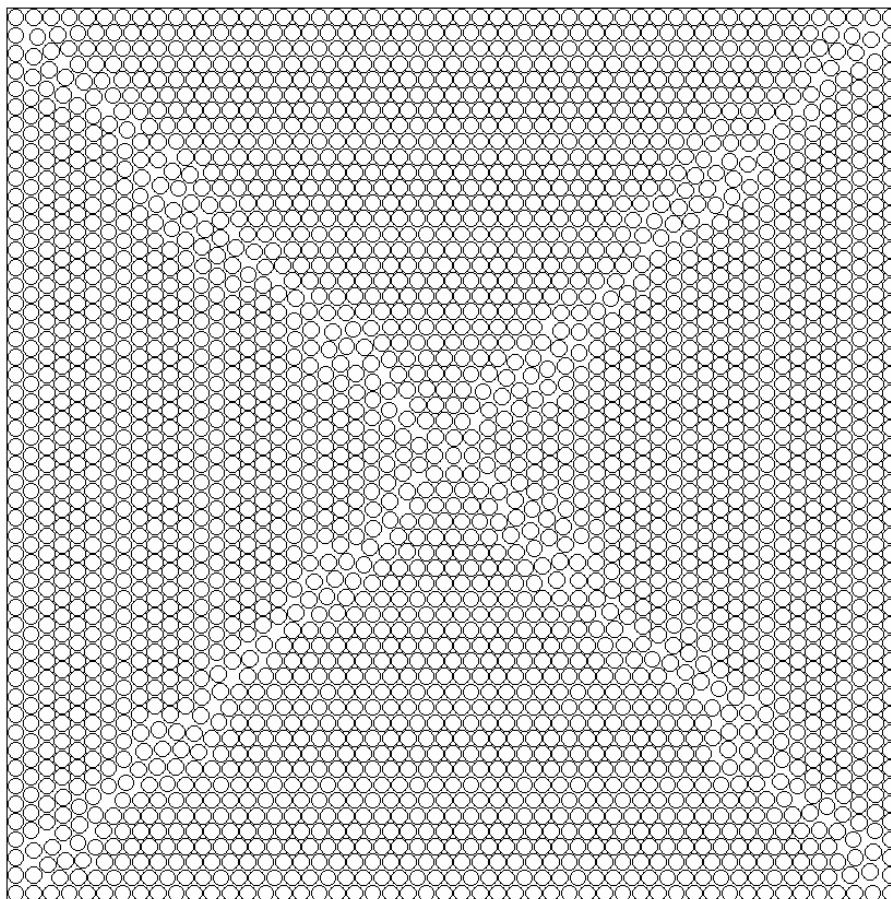


Figure 44. La structure après optimisation ou équilibrage.

La structure équilibrée des disques est transformée en un diagramme de Laguerre illustrée par la Figure 45.

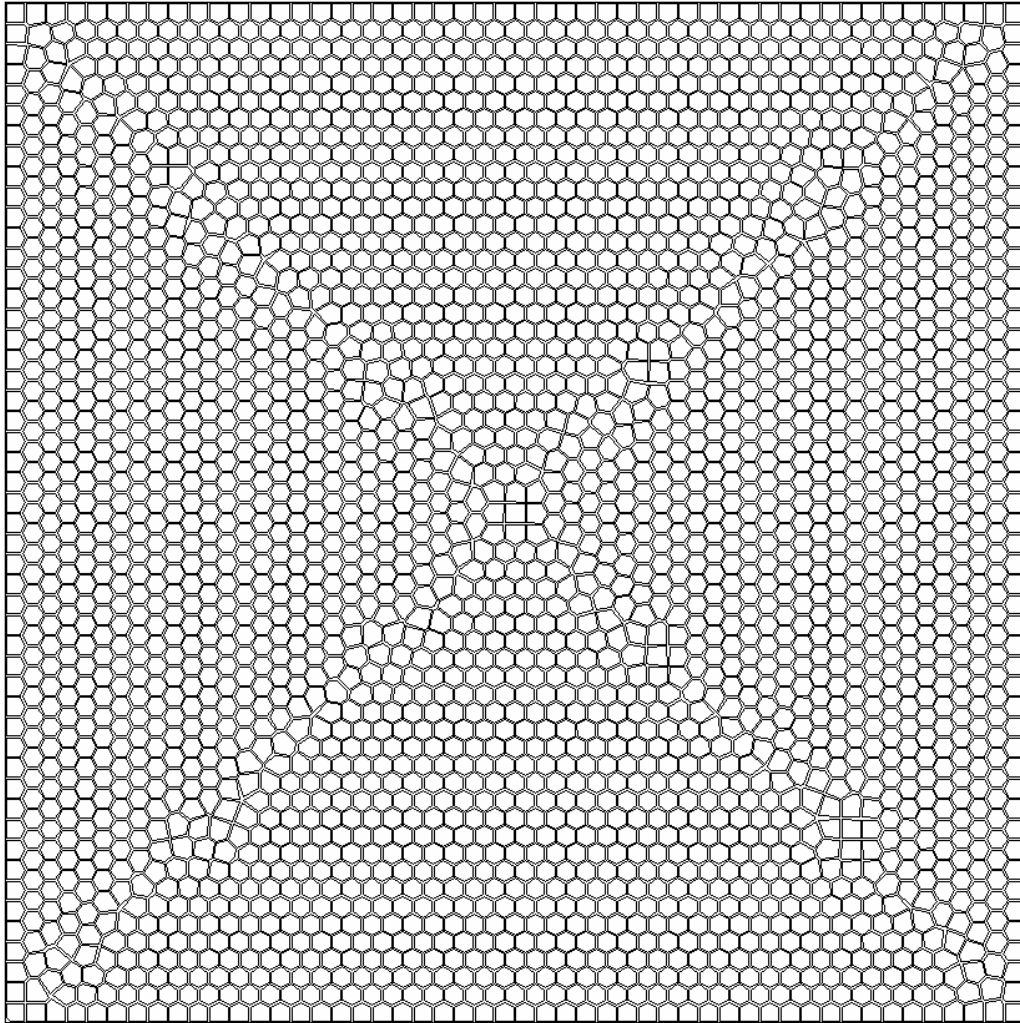


Figure 45. La structure avec des cellules de Voronoï.

Cas des rayons variables. On considère un domaine carré de dimensions $50 \times 50 \text{ nm}$ avec une distribution de taille de grains définie par :

Rayons (nm)	Probabilité
$[0.2, 0.4[$	0.30
$[0.4, 0.6[$	0.20
$[0.6, 0.9[$	0.50

Tableau 4 : Distribution de l'exemple traité.

De même on suppose que l'épaisseur des joints de grain est constante et égale à 0.1 nm .

Dans ce cas la structure est générée 0.02 s avec **1217** disques et une densité de **0.8019** (voir Figure 46).

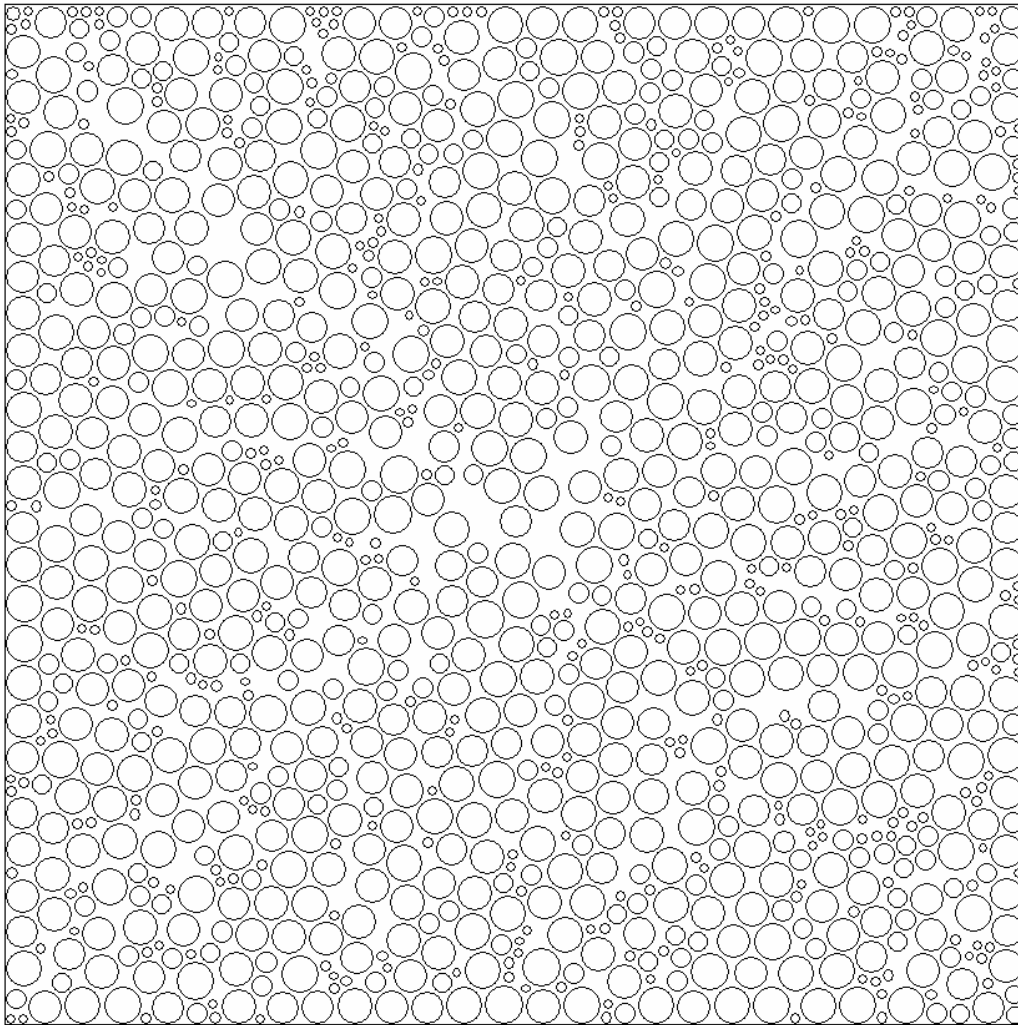


Figure 46. Structure générée dans le cas rayons variables.

La distribution de taille de grains résultante est donnée dans le Tableau 5.

Rayons (nm)	Probabilité origine	Probabilité résultante
[0.2, 0.4[0.30	0.311
[0.4, 0.6[0.20	0.189
[0.6, 0.9[0.50	0.50

Tableau 5 : Distributions origine est résultante de l'exemple traité.

On remarque une **très faible** différence entre les deux distributions pour les deux premiers intervalles. Comme dans l'exemple précédent, la structure générée est équilibrée (voir Figure 47).

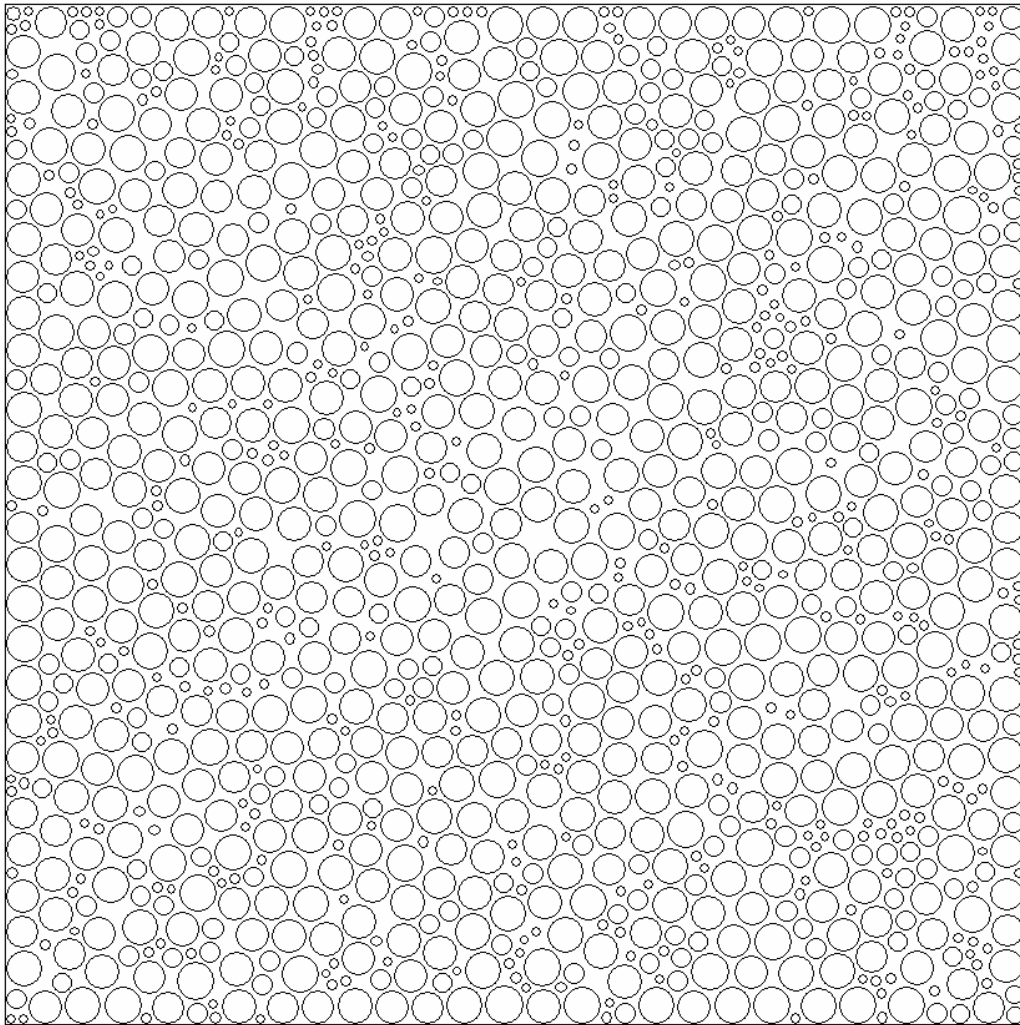


Figure 47. La structure après optimisation ou équilibrage.

Le diagramme de Laguerre correspondant à cette structure (équilibrée) est illustré par la Figure 48.

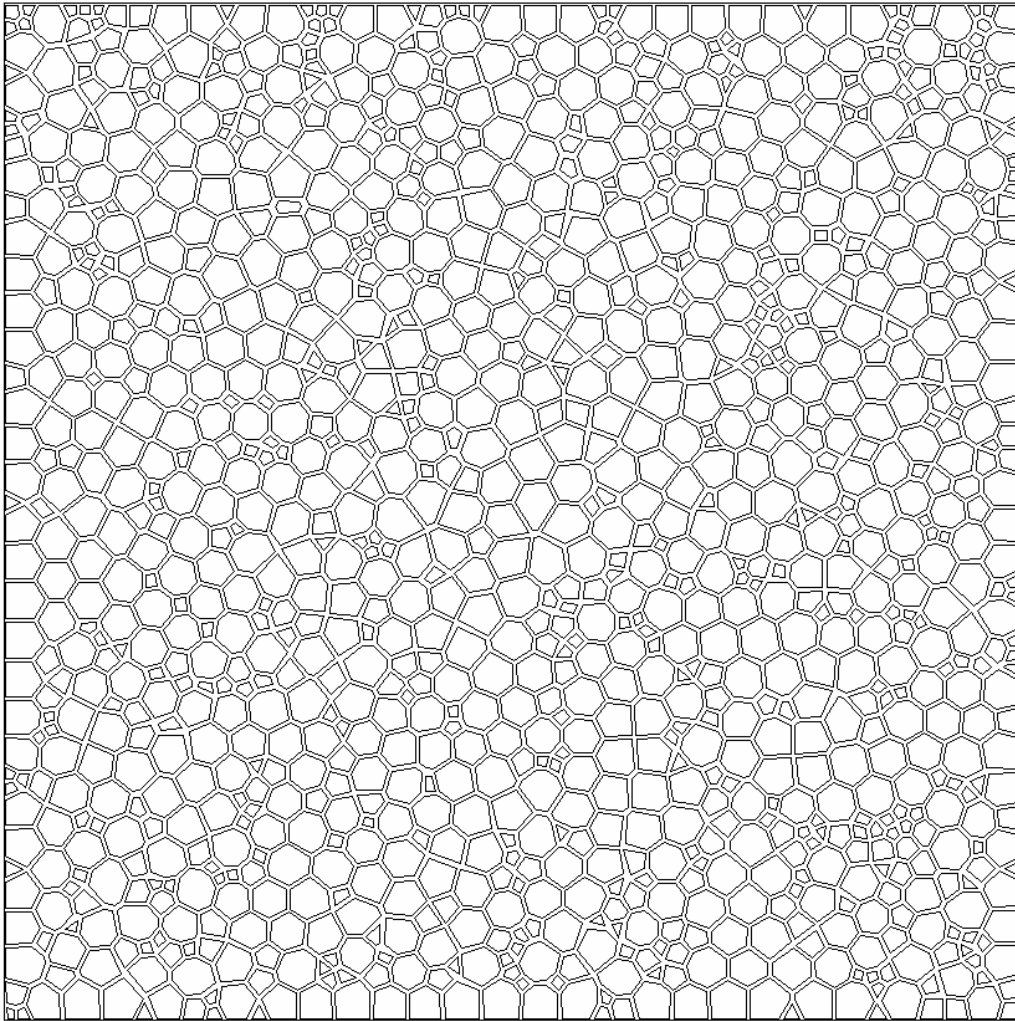


Figure 48. Diagramme de Laguerre de la structure générée et optimisée.

Dans ce diagramme, on retrouve les épaisseurs exactes des joints de grains moyennant une légère violation de la distribution initiale de taille de grains.

VII. Conclusions et perspectives

Dans ce rapport, nous avons considéré le problème de la génération des structures granulaires sous contraintes en deux dimensions. Après un état de l'art sur les différentes méthodes existantes, nous avons introduit une nouvelle méthode basée sur une approche frontale utilisée généralement dans le contexte du maillage.

En effectuant une comparaison avec des algorithmes existants, nous avons montré que notre méthode permet des gains importants en temps de calcul ainsi qu'en densité ou taux de remplissage.

L'approche frontale utilisée génère souvent des hétérogénéités quant à la répartition de l'espace vide dans la structure. Ainsi, nous avons proposé aussi un algorithme d'optimisation pour l'équilibrage de l'espace vide dans la structure. La méthode proposée est basée sur des techniques de relocalisation de points sous contraintes.

Enfin, nous avons introduit une méthode simple pour transformer la structure composée de disques en un assemblage de polygones. L'approche proposée utilise les diagrammes de Laguerre, qui ne sont qu'une généralisation des diagrammes de Voronoï.

L'étape de modélisation en 2D doit être suivie de l'étape de discrétisation ou maillage des ces structures, et fera l'objet de notre prochaine étude. Par ailleurs, l'extension en 3D des algorithmes présentés ne semble pas poser trop de difficultés et représentera en grande partie nos futurs développements.

VIII. Bibliographie

- [1] K. Lu and J. Lu .Nanostructured surface layer on metallic materials induced by surface mechanical attrition treatment. *Materials Science and Engineering A*, Volumes 375-377, 15 July 2004, Pages 38-45.
- [2] K.S. Kumar, H. Van Swygenhoven and S. Suresh. Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys. *Acta Materialia*, Volume 51, Issue 19, 25 November 2003, Pages 5743-5774
- [3] N. R. Tao, Z. B. Wang, W. P. Tong, M. L. Sui, J. Lu and K. Lu. An investigation of surface nanocrystallization mechanism in Fe induced by surface mechanical attrition treatment. *Acta Materialia*, Volume 50, Issue 18, 28 October 2002, Pages 4603-4616.
- [4] Katalin Bagi. Institute Henri Poincaré, Session on Granular Matter. Thematic meeting on numerical simulations, 16-18 March 2005, Paris
- [5] Boris D. Lubachevsky and Frank H. Stillinger. Geometric properties of random disk packings. *Journal of Statistical Physics*, Volume 60, Numbers 5-6, Pages : 561–583, September 1990.
- [6] Y. T. Feng, K. Han and D. R. J. Owen. Filling domains with disks : an advancing front approach. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. Volume 56, Issue 5, Pages 699 – 713, 26 Nov 2002.
- [7] Katalin Bagi. An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies. *Granular Matter* (2005) 7 : 31–43
- [8] Houman Borouchaki, Patrick Laug. Le mailleur adaptatif bidimensionnel BL2D : manuel d'utilisation et documentation. Rapport de recherche INRIA N° 0185 Décembre 1995.
- [9] Houman Borouchaki, Paul-Louis George, Frédéric Hecht, Patrick Laug et Eric Saltel. Mailleur bidimensionnel de Delaunay gouverné par une carte de métriques. Partie I : Algorithmes. Rapport de recherche INRIA N° 2741 Décembre 1995.
- [10] Jiang, M.J., Konrad, J.M., Leroueil, S. 2003. An efficient technique for generating homogeneous specimens for DEM studies. *Computers & Geotechnics*, vol. 30, no. 7, pp. 579-597.
- [11] X. Lin & T.-T. Ng, A three-dimensional discrete element model using arrays of ellipsoids. *Geotechnique* 47(2), (1997), p. 319–329.
- [12] Itasca, PFC2D 2.00 Particle Flow Code in Two Dimensions, Minneapolis Minnesota, 1998
- [13] D. Boutt & B. McPherson, “The role of particle packing in modeling rock mechanical behavior using discrete elements”. In : B. K. Cook and R. P. Jensen, (Eds.), *Discrete Element Methods, 3rd international conference*, (ASCE, New Mexico 23-25 September, 2002), p. 86–92.
- [14] H. Sakaguchi & A. Murakami, Initial packing in discrete element modeling. In : B. K. Cook and R. P. Jensen (Eds.), *Discrete Element Methods, 3rd international conference*, (ASCE, New Mexico 23-25 September, 2002), p. 104–106.
- [15] C. O’Sullivan, *The Application of Discrete Element Modelling to Finite Deformation Problems in Geomechanics*, Ph. D. thesis, University of California, Berkeley , 2002.
- [16] P. Thomas, *Discontinuous deformation analysis of particulate media*, Ph. D. thesis, (Univ. of California, Berkeley, 1997).
- [17] J.-A. Ferrez, *Dynamic Triangulations for Efficient 3-D simulation of Granular Materials*, Ph. D. thesis, (Ecole Polytechnique Federal de Lausanne, Lausanne, 2001).
- [18] Evans, J.W : Random and cooperative sequential adsorption. *Rev. Mod. Phys.* **65**, 1281–1304 (1993).
- [19] D. Stoyan. *Models of random systems of non-intersecting spheres*, Prague Stochastics’98, JCMF 1998, pp. 543–547.
- [20] K. Bagi. A quasi-static numerical model for micro-level analysis of granular assemblies. *Mechanics of Materials* **16**(1–2), 101–110, (1993).

- [21] D. Stoyan. Models of random systems of non-intersecting spheres. Prague Stochastics'98, JCMF 1998, pp. 543–547.
- [22] O. Häggström et R. Meester. Nearest neighbour and hard sphere models in continuum percolation. Random Struct. Algor. **9**, 295–315 (1996).



Unité de recherche INRIA Rocquencourt
Domaine de Voluceau - Rocquencourt - BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)
Unité de recherche INRIA Futurs : Parc Club Orsay Université - ZAC des Vignes
4, rue Jacques Monod - 91893 ORSAY Cedex (France)
Unité de recherche INRIA Lorraine : LORIA, Technopôle de Nancy-Brabois - Campus scientifique
615, rue du Jardin Botanique - BP 101 - 54602 Villers-lès-Nancy Cedex (France)
Unité de recherche INRIA Rennes : IRISA, Campus universitaire de Beaulieu - 35042 Rennes Cedex (France)
Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes : 655, avenue de l'Europe - 38334 Montbonnot Saint-Ismier (France)
Unité de recherche INRIA Sophia Antipolis : 2004, route des Lucioles - BP 93 - 06902 Sophia Antipolis Cedex (France)

Éditeur
INRIA - Domaine de Voluceau - Rocquencourt, BP 105 - 78153 Le Chesnay Cedex (France)
<http://www.inria.fr>
ISSN 0249-6399